Notas del curso

El Arte de resolver la ecuación de Schrödinger

Alexander V. Turbiner y Juan C. López Vieyra

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Agosto, 2024

A la memoria de Mikhail A (Misha) Shubin (1944 - 2020) - notable matemático y amigo

Índice general

1. La Ecuación de Schrödinger 1
1.1. La Ecuación Estacionaria de Schrödinger . . . 1
1.1.1. Espectro (discreto) 3
1.1.2. Hamiltoniano 4
1.1.3. Cuantización 4
1.1.4. Motivaciones Experimentales 7
1.1.5. Interpretación Física 8
1.1.6. Condiciones de frontera 9
1.1.7. Unidades Atómicas 10

2. Elementos de la Teoría de Operadores 13
2.1. Espacios Lineales 13
2.2. Espacio Vectorial Normado 16
2.2.1. Producto escalar 16
2.2.2. Ortogonalidad 17
2.2.3. Producto vectorial 18
2.3. Noción de Operador 18
2.3.1. Valores de Expectación 21
2.4. Vectores y Valores Propios 21
2.5. Hermiticidad 23

2.6. Degeneración 26
2.7. Espacio Funcional 27
2.7.1. Espacio de Hilbert 28
2.8. Procedimiento de Gram-Schmidt 28
2.8.1. Bases Ortogonales (Cambio de Base) . 29
2.8.2. Procedimiento de Gram-Schmidt . . . 29
2.8.3. Notación para Bases Ortogonales . . . 30
2.9. Polinomios Ortogonales 31
2.9.1. Polinomios de Legendre 31
2.9.2. Polinomios de Hermite 33

3. El Operador de Sturm-Liouville 39
3.1. Definición 39
3.1.1. Condiciones de frontera 40
3.1.2. Integral de Energía 41
3.1.3. Hermiticidad 41
3.1.4. Wronskiano 42
3.2. Teorema de Oscilación de Sturm 46
3.2.1. Teorema de Comparación de Sturm . . 47
3.3. Reducción a la forma de Schrödinger 49
3.3.1. Transformación de Norma 51
3.4. Función de Green 54
3.4.1. Función $\delta(x)$ de Dirac 55
3.4.2. Función de Green de Sturm-Liouville . 59
3.5. Representación Matricial 62
3.5.1. Procedimiento de Lanczos 65
3.5.2. Otra demostración 68
3.6. Diagonalización del Hamiltoniano 69
3.6.1. Ejemplos 71
3.6.2. Teorema Cayley-Hamilton y alrededor 72

4. Funciones analíticas (repaso) 77
4.1. Funciones analíticas 77
4.2. Tipos de Funciones Analíticas 79
4.3. Funciones Singulares 80

4.3.1. Singularidades Aisladas (Polos) 80
4.3.2. Singularidades Esenciales 81
4.3.3. Puntos Rama (Branch Points) 81
4.3.4. Función $\sqrt{z}$ 81

5. Problema espectral de dos niveles 87
5.1. Estudio de la Ecuación Cuadrática 87
5.1.1. Propiedades analíticas de los eigenvalores 87
5.1.2. Análisis Asintótico 91
5.1.3. Quasi Crossing 92
5.1.4. Modos Cero (Zero Modes) 93
5.2. Teoría de Perturbaciones $_{\mathrm{I}}$ (T.P.) 94
5.2.1. Significado de la teoría perturbativa . . 94
5.2.2. T. P. Ecuación cuadrática I 95
5.2.3. T. P. Ecuación cuadrática II 98
5.2.4. T. P. Ecuación cuadrática III 100
5.3. Análisis Asintótico (Interpolación) 102
5.3.1. Términos subdominantes 105
5.3.2. Interpolación 106

6. Teoría de Perturbaciones $_{\mathbf{II}}$ 111
6.1. T.P. de Rayleigh-Schrödinger 112
6.1.1. El potencial de oscilador anarmónico . 117
6.1.2. Otros Métodos Perturbativos 120

7. El Problema Inverso de la Mecánica Cuántica 121
7.1. El Problema Inverso 121
7.2. Problemas cuasiexactamente solubles 124
7.2.1. Potencial séxtico 124
7.2.2. Problema inverso en ecuación de Riccati 127
7.2.3. Oscilador Armónico: problema inverso 128
7.2.4. Oscilador Anarmónico: T.P. 130

8. Teoría de Perturbaciones $_{\mathbf{III}}$ 133
8.1. Una Teoría de perturbaciones multiplicativa . . . 133
8.1.1. Relación con T.P. de Rayleigh-Schrödinger 139

8.2. El oscilador armónico. T.P. multiplicativa 141

9. Ecuación generalizada de Bloch 147
9.1. La ecuación de Riccati-Bloch (RB) 147
9.2. Ecuación Generalizada de Bloch (EGB) 148
9.3. Expansión perturbativa 151

10. Oscilador Anarmónico 155
10.1. El Oscilador Anarmónico $V = x^2 + \lambda x^4$ 155
10.1.1. Ecuación de Riccati-Bloch 156
10.1.2. Teoría Perturbativa 156
10.1.3. Ecuación generalizada de Bloch 164
10.1.4. Simetría de paridad de RB 166
10.1.5. Simetría de paridad de la EBG 168
10.2. Análisis asintótico de la ecuación de Schrödinger 170
10.2.1. Interpolación 170

11. El Método Variacional 173
11.1. Método Variacional 173
11.1.1. Selección de la función de prueba . . . 174
11.1.2. El oscilador anarmónico 177

12. Conclusiones: Fin del Curso 181

A. Funciones Especiales 183
A.1. Función *Gamma* 183
A.2. Función *Beta* 185
A.3. Función *Psi* 186

B. El Oscilador Armónico 187

C. Soluciones a los Problemas 199

D. Sturm-Liouville: Algunos Teoremas 213

E. El Potencial de Pöschl-Teller 215

F. Algunas Integrales 221

G. Cuantización de Bohr-Sommerfeld 227

H. Anuncio del Curso 241

Prefacio

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \;=\; \hat{H}\Psi(x,t)\;,$$

es la ecuación central de la física cuántica. Miles y miles de artículos se han publicado dedicados a buscar soluciones de esta ecuación para describir la Naturaleza; los fenómenos físicos a escala microscópica. En su forma particular - la ecuación *estacionaria* de Schrödinger,

$$\hat{H}\,\Psi(x) \;=\; E\,\Psi(x)\;,$$

es la ecuación para el espectro de energías del Hamiltoniano $\hat{H}$, que nos da la descripción de los estados ligados en la física atómica, molecular y la física nuclear.

La tarea de este curso es considerar el caso más simple - la física cuántica unidimensional, en la que la ecuación de Schrödinger estacionaria es una ecuación de una variable, es decir, una ecuación diferencial ordinaria,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\partial_x^2\,\Psi(x) \;+\; V(x)\Psi(x) \;=\; E\,\Psi(x)\;,\quad \partial_x \equiv \frac{d}{dx}\;.$$

Este caso ha sido mucho más desarrollado desde el punto de vista de las matemáticas que los casos multidimensionales. Esta ecuación ya contiene muchas de las propiedades (y problemas) de las ecuaciones con múltiples variables.

Estas notas del curso están basadas en las presentaciones del curso avanzado que durante los últimos 20 años impartimos en los últimos semestres de la licenciatura en física de la Facultad de Ciencias de la UNAM. Muchos de los temas que discutimos en el curso no forman parte de un curso estándar de Mecánica Cuántica. El único libro de texto que ofrecemos como básico para su consulta es el libro Mecánica Cuántica de L.D. Landau y E.M. Lifschitz, volumen 3.

Por último queremos agradecer a los doctores Horacio Olivares Pilón (UAM-I), Héctor Medel Cobaxin (ITESM), Marcos Alejandro García García (IFT, UAM-CSIC, IF-UNAM), Adrian Escobar Ruíz (UAM-I), Juan Carlos del Valle Rosales (ICN-UNAM, IF-UNAM) y Daniel Julián Nader (UV) que, como estudiantes, participaron en alguna de las diferentes ocasiones que hemos impartido este curso, por sus valiosos comentarios que han servido para mejorar constantemente estas notas. Las sugerencias y comentarios del Doctor Nikolai Vasilevski (1948-2024), el Profesor Emérito del Cinvestav - un matemático ruso-ucraniano-mexicano bien reconocido - sobre la primera parte del curso (en particular, Lección 2) fueron de gran valor e importancia.

LECCIÓN 1

La Ecuación de Schrödinger

1.1 La Ecuación Estacionaria de Schrödinger

En el año de 1926, Erwin Schrödinger[1] escribió su famosa ecuación[2] (c.f. ecuación (16) en el artículo original [1])

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\,\psi = E\,\psi\,.$$

Esta ecuación es un caso particular de la ecuación de onda

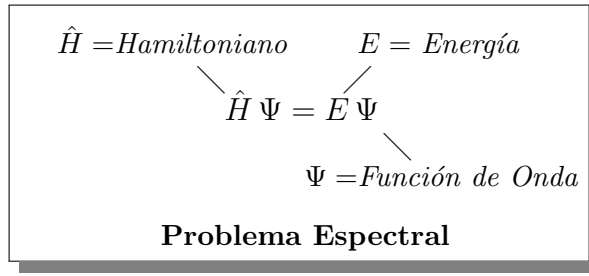
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi\,,$$

que describe la evolución en el tiempo de la función de onda $\psi(x,t)$ para el Hamiltoniano $\hat{H}$. Para los estados *estacionarios*

[1](Viena, 12 de agosto de 1887 - 4 de enero de 1961) físico austríaco, Premio Nobel de Física en 1933 *for the discovery of new productive forms of atomic theory.*

[2]La constante $\hbar$ se denomina *constante de Planck reducida* y tiene un valor de $\hbar = h/(2\pi) = 1{,}054571817 \times 10^{-34} J\,s$. La constante de Planck es $h = 6,62607015 \times 10^{-34}$ J s.

las partes espacial y temporal de la función de onda se separan como $\psi(x,t) = \Psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ con el parámetro E (la energía) como la constante de separación. La noción de *estado estacionario* implica que la función $\Psi(x)$ debe ser normalizable, o un elemento del espacio de Hilbert. En este caso obtenemos la ecuación estacionaria



Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con la condición a la frontera de que $\Psi(x)$ sea una función normalizable. Entonces, es un problema de autovalores y vectores propios que describe el estado cuántico de un sistema físico.

En este curso solo vamos a considerar problemas en una dimensión espacial.

- $\Psi(x)$ = función de onda, o función *propia*, o autofunción o *eigenfunción*
- E = parámetro espectral (Energía): autovalor, o valor propio o eigenvalor
- $\hat{H}$ = Operador Hamiltoniano
- $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$,
  $\hat{T}$ = Energía Cinética, $\hat{V} = V(x)$ = Energía Potencial

1.1.1 Espectro (discreto)

Energías

$$E_0,\, E_1,\, E_2,\, \ldots\, E_n, \quad \ldots\, E_\infty\,, \quad (\text{orden: } E_n \leq E_{n+1})$$

Autofunciones

$$\Psi_0,\, \Psi_1,\, \Psi_2,\, \ldots\, \Psi_n, \quad \ldots\, \Psi_\infty\,,$$

$E_0, \Psi_0 \equiv$ *Estado base, o Estado basal o Estado fundamental.*

Un problema fundamental en la mecánica cuántica es la determinación del Espectro de Energías (valores propios). Un sistema físico cuántico puede tener un número finito[3] o infinito de estados ligados que corresponden a energías discretas, lo que significa que la energía está cuantizada. Por ejemplo:

- El oscilador armónico en una dimensión con potencial (ver Figura 1.1(a)):

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2\, x^2\,, \quad x \in (-\infty, +\infty)\,,$$

en donde k es la constante de Hook, m es la masa de una partícula que se mueve en este potencial y $\omega = \sqrt{k/m}$ es la frecuencia de oscilación. El espectro de energías es discreto y equiespaciado:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

en donde $\hbar = h/2\pi$ es la constante de Planck reducida.

[3] particularmente cero.

- El *oscilador de Morse*[4] en una dimensión con potencial (ver Figura 1.1(b)):

$$V(x) = D\,(e^{-\alpha\,x} - 1)^2\,, \quad x \in (-\infty, +\infty)\,, \quad \alpha > 0\,,$$

para $D > 0$ existe un número finito de estados ligados, i.e. tiene un espectro discreto y finito. Existe $D_{\rm crit}$ tal que cuando $D_{\rm crit} > D$ no existe ningún estado ligado. Este potencial esta caracterizado por dos parámetros: el parámetro D mide la *profundidad* del pozo, y el parámetro α la *anchura*. El potencial $V(x)$ tiene un mínimo, $V = 0$ en $x = 0$, $V(x) \simeq D\alpha^2 x^2 + \ldots$ y tiende asintóticamente a $V \to D$ para $x \to +\infty$, y $V \to \infty$ para $x \to -\infty$. El espectro de energías es

$$E(n) = \hbar\omega_0(n + 1/2) - [\hbar\omega_0(n + 1/2)]^2/4D\ ,$$

$n = 0, 1, \ldots n_{\rm max}$, con $\omega_0 = \alpha\sqrt{2D/m}$.

1.1.2 Hamiltoniano

En la mecánica clásica el Hamiltoniano de una partícula unidimensional (de un grado de libertad) se define como

$$H = T + V = \frac{p^{\,2}}{2m} + V(x)\,, \tag{1.1}$$

en donde p, x, m son el momento, la coordenada y la masa de la partícula, respectivamente; $V(x)$ es el potencial.

1.1.3 Cuantización

En la mecánica cuántica el momento de la partícula esta representado por un operador diferencial:

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,,} \tag{1.2}$$

[4]El potencial de Morse [2], se usa como una buena aproximación al potencial de interacción entre los átomos de una molécula diatómica.

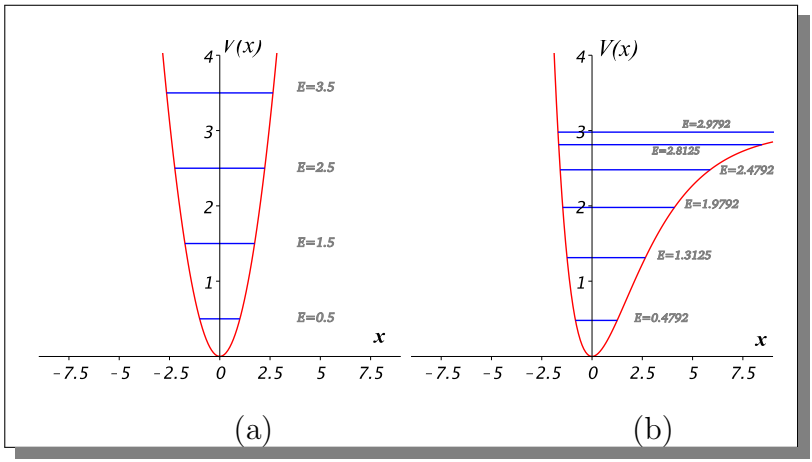


Figura 1.1: (a) Potencial de Oscilador Armónico para el caso $m = 1, \hbar = 1, \omega = 1$ (las líneas horizontales indican las energías cuantizadas $E_n = n + \frac{1}{2}$ para $n = 0, 1, 2 \ldots$), y (b) Potencial de Oscilador de Morse para el caso $m = 1, \hbar = 1, \omega = 1, D = 3$ y $\alpha = \sqrt{\frac{m}{2D}}\omega = 1/\sqrt{6}$. Las líneas horizontales representan las energías $E_n^{\text{Morse}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{12}\left(n + \frac{1}{2}\right)^2$ de sus seis estados ligados: $E = [0{,}479167, 1{,}31250, 1{,}97917, 2{,}47917, 2{,}81250, 2{,}97917]$.

en donde x es la coordenada cartesiana[5], i es la unidad imaginaria. Esta formulación conduce directamente a la relación de incertidumbre de Heisenberg[6] $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ que implica que

[5]Las variables de posición $\hat{x}$, y de momento $\hat{p}$ no conmutan entre si, *i.e.* $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Se deja al lector como ejercicio probar esta relación. Nota: El conmutador de a y b se define como $[a, b] = ab - ba$.

[6]Werner Karl Heisenberg Wurzburgo, 5 de diciembre de 1901 - Múnich, 1 de febrero de 1976, fue un físico teórico alemán fue uno de los pioneros y creadores de la Mecánica Cuántica. En 1923 fue ayudante del físico alemán Max Born en la Universidad de Gotinga. Es conocido sobre todo por formular el principio de incertidumbre. Fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1932 "for the creation of quantum mechanics, the application of which has, inter alia, led to the discovery of

en la mecánica cuántica no podemos medir simultáneamente la posición y la velocidad de una partícula con precisión ilimitada.

- $\hbar =$ *constante de Planck*:

$$\begin{aligned} h &= 6{,}6260693 \times 10^{-34}\text{J s}\,, \\ \hbar &= \frac{h}{2\pi} = 1{,}05457168 \times 10^{-34}\text{J s}\,. \end{aligned}$$

$\hbar$ es un parámetro muy pequeño que puede producir efectos físicos grandes. La constante de Planck $h(\hbar)$ tiene dimensión de *acción*[7,8].

- El Hamiltoniano $\hat{H}$ es un *operador diferencial*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\,,$$

en el caso de una partícula tridimensional

$$\Delta \equiv \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}\,, \qquad \text{(Operador de Laplace, ó } \textit{Laplaciano}\text{)}$$

en coordenadas cartesianas.

---

the allotropic forms of hydrogen".

[7]La acción $S = \int L dt$ (en donde el integrando $L = T - V$ es llamado *Lagrangiano*) es una funcional de la trayectoria. La trayectoria real que sigue el sistema es aquella que minimiza la acción.

[8]Las reglas de cuantización de Bohr-Wilson-Sommerfeld [3, 4] establecen que la integral de *acción* tomada sobre un ciclo esta cuantizada de acuerdo con $\oint p\,dq = nh$, $n \in \mathbb{N}$, donde q es una coordenada generalizada (periódica), y p su momento generalizado.
Arnold Sommerfeld, dic 5 1868–abril 26 1951, ha sido el supervisor de doctorado de más futuros ganadores del Premio Nobel en la historia (Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Peter Debye y Hans Bethe). Entre 1917 y 1951 fue nominado 84 veces para recibir el Premio Nobel.

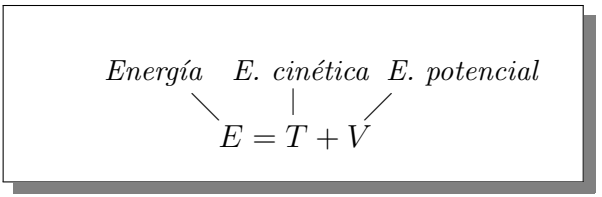
1.1.4 Motivaciones Experimentales

¿Qué significa la cuantización?

En la mecánica clásica siempre suponemos que una cantidad física toma valores contínuos. En cambio, en la mecánica cuántica, dicha cantidad física solo toma valores discretos. Este es el significado de la cuantización. El mejor ejemplo de cuantización es la cuantización de la energía del sistema.

¿Por qué es importante introducir este concepto?

En la mecánica clásica la energía E puede tomar cualquier valor contínuo.



A finales del siglo XIX y principios del siglo XX, los experimentos espectroscópicos con gas de Hidrógeno realizados por H. W. Vogel, Huggins T. Lyman y otros condujeron a J.J. Balmer a proponer una fórmula empirica que describiera lo siguiente:

- el *espectro* (líneas de absorción) es discreto (!)
- frecuencias angulares experimentales ω están descritas con mucha precisión por la fórmula:

$$\omega_{n,k} = \omega_0 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) , \quad n, k = 1, 2, 3, \ldots , \quad k > n ,$$

- $\omega_0 =$ *constante de Balmer*
- $n = 1$ serie de Lyman ($\sim$ 1910) (ultravioleta)
- $n = 2$ serie de Balmer ($\sim$ 1885) (visible-ultravioleta)

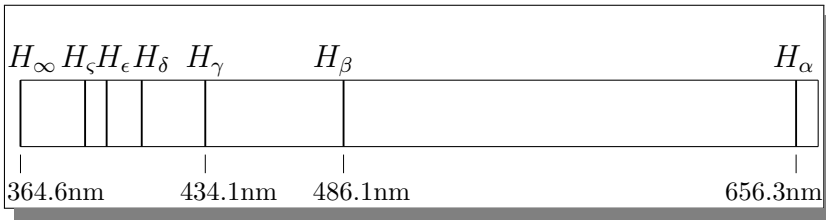


Figura 1.2: Serie de Balmer en el espectro visible de longitudes de onda $\lambda \sim 390 - 750$nm (1nm=1×10^{-9} m).

en donde ω es la frecuencia angular (2π veces la frecuencia ν). La longitud de onda correspondiente es $\lambda = 2\pi c/\omega = c/\nu$, con $c = 299,792,458\,\mathrm{m/s}$ es la velocidad de la Luz. Entonces, $\omega_0 = 2\pi c R_H$ en donde $R_H \simeq 1{,}097 \times 10^7 \mathrm{m}^{-1}$ es la constante de Rydberg.

Idea revolucionaria: En la Mecánica Cuántica las energías de los estados ligados son discretas (Cuantización).

Entonces, ¿qué es necesario hacer para que H tenga un espectro discreto?

H tiene que ser un operador, no una función!

1.1.5 Interpretación Física

En matemáticas existe la noción de *problema espectral*:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)\,,$$

con algunas condiciones de frontera. Aquí, E tiene sentido de parámetro espectral.

Pero, ¿qué es $\psi(x)$?

$\psi(x)$ es un objeto nuevo que no podemos observar!

Interpretación física (Max Born[9], 1926):

$$|\psi(x)|^2 = \text{probabilidad de encontrar al sistema en el punto } x.$$

En general, la función $\psi(x)$ es una función compleja.

1.1.6 Condiciones de frontera

¿Cuáles son las condiciones de frontera en un problema físico?

Las condiciones de frontera en el caso del experimento de Balmer-Lyman son: el movimiento del sistema (átomo) esta restringido a un dominio finito, y por lo tanto[10]

$$\int_{\mathcal{G}} |\psi(x)|^2 \, dx < \infty \,, \tag{1.3}$$

en donde $\mathcal{G}$ designa el espacio físico (espacio de configuración) en donde estudiamos el sistema, el espacio, o dominio, en el que el sistema esta definido. La integral (1.3) tiene el significado de probabilidad total, y usualmente seleccionamos ser igual a 1.

• Significa que $|\psi(x)|^2 \to 0$ cuando $|x| \to \infty$ (para garantizar la convergencia de la integral y tener entonces una interpretación de $|\psi(x)|^2$ como probabilidad).

• Sólo podemos cumplir la condición (1.3) en el problema espectral para algunos valores discretos de la energía. Este es

[9]1882, Breslau Alemania (hoy Polonia), Premio Nobel en Física (1954), *for his fundamental research in quantum mechanics, especially for his statistical interpretation of the wavefunction.*

[10]El espacio de funciones de cuadrado integrable se denota como $\mathcal{L}^2$ y se le llama Espacio de Hilbert.

el origen de la cuantización de la energía

- Precio que pagamos al cuantizar: existe una probabilidad infinitamente pequeña de encontrar al sistema en $|x| \to \infty$.

- Principio de correspondencia

$$\hbar \to 0 \qquad \text{Mecánica Cuántica} \to \text{Mecánica Clásica}$$

Este límite es absolutamente no-trivial. Por ejemplo, la aparición de trayectorias clásicas no existe en la mecánica cuántica.

1.1.7 Unidades Atómicas

Existe una forma natural de elegir un sistema de unidades para los sistemas cuánticos (microscópicos). A este sistema se le denomina unidades atómicas (a.u. por sus siglas en inglés). Por definición los valores numéricos de las siguientes constantes físicas fundamentales toman un valor unitario[11]:

- Masa del electrón m_e
- Carga elemental del electrón e
- Constante de Planck reducida $\hbar \ = \ \frac{h}{2\pi}$
- Constante de Coulomb $\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)}$

En unidades atómicas el operador Hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H} \ = \ -\frac{1}{2}\Delta \ + \ V \ ,$$

[11] En unidades atómicas la constante de estructura fina $\alpha = \dfrac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c}$ toma el valor $\alpha \simeq \dfrac{1}{137}$ y la velocidad de la luz $c = \frac{1}{\alpha} \simeq 137$.

y a la unidad atómica de energía se le denomina Hartree[12].

Para facilitar el análisis de los problemas que estudiaremos será conveniente elegir unidades apropiadas que simplifiquen las ecuaciones. Por ejemplo, el Hamiltoniano del oscilador armónico en una dimensión esta dado en general por

$$H_{\text{osc.arm.}} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}\,x^2 \ ,$$

en donde m es la masa de la partícula, y ω es la frecuencia del oscilador. El problema se simplifica esencialmente en unidades atómicas $\hbar = 1$, $m_e = 1$. Elegimos convenientemente $m = m_e$, $\omega = 1$ y multiplicando [13] por 2 para llegar al nuevo Hamiltoniano:

$$H_{\text{osc.arm.}} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \ .$$

Siempre y cuando podamos, haremos este tipo de simplificaciones en las fórmulas.

[12]En unidades atómicas la energía de ionización del átomo de Hidrógeno es $E_{\text{I}}^{\text{H}} = \frac{1}{2}$ Hartree, también denominada Rydberg.

[13]Esto implica que la energía aparece en unidades de Rydberg.

LECCIÓN 2

Elementos de la Teoría de Operadores

2.1 Espacios Lineales

En lo sucesivo vamos a suponer que estamos sobre la línea real, $x \in \mathbb{R}$.

En primer lugar, vamos a introducir el concepto de un *Espacio Lineal* o *Espacio Vectorial*:

Tomemos un conjunto de objetos $f_1, f_2, \ldots f_n$ (sean funciones, matrices, etc...) a los que llamaremos *elementos* o *vectores* del espacio. Con estos objetos podemos formar otros objetos similares por medio de una operación interna fundamental de *suma* (o superposición) de elementos, y de una operación externa de multiplicación por constantes (escalares) de un *campo*.

Un espacio lineal es un conjunto V cuyos elementos se llaman *vectores* y en el cual se definen las operaciones de adición (interna) y multiplicación por escalares (externa).

En un espacio lineal se cumplen los siguientes *Axiomas*:

Para todo f_1, f_2, f_3 en el espacio vectorial V y α, β, γ constantes pertenecientes a un campo escalar F se cumple que

- $f_1 + (f_2 + f_3) = (f_1 + f_2) + f_3$, asociatividad de la suma de vectores
- $f_1 + f_2 = f_2 + f_1$, conmutatividad de la suma de vectores
- $\exists\, \mathbf{0} \in V$, tal que $f + \mathbf{0} = f$, $\forall f \in V$, $\mathbf{0} \equiv$ vector nulo
- $\forall\, f \in V$, $\exists - f \in V$, (inverso aditivo) tal que $f + (-f) = \mathbf{0}$
- $\alpha(\beta f) = (\alpha\beta) f$
- $1\, f = f$, identidad multiplicativa en el campo F
- $\alpha(f_1 + f_2) = \alpha f_1 + \alpha f_2$, distributividad de la multiplicación
- $(\alpha + \beta) f = \alpha f + \beta f$

Ahora introducimos la siguiente

Definición 1

Se dice que $f_1, f_2, \ldots f_n \in V$ son vectores linealmente independientes, si la ecuación lineal

$$\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \ldots + \alpha_n f_n = \mathbf{0}\,, \quad \alpha_i \in F \,\text{escalares constantes}\,,$$

tiene solución única: $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_n = 0$.

Por ejemplo, para las dos funciones $f_1 = x$, $f_2 = x^2$ se tiene que

$$\alpha_1\, x + \alpha_2\, x^2 = 0\,, \quad \forall\, x\,, \quad \Rightarrow \alpha_1 = \alpha_2 = 0\,,$$

i.e. x y x^2 son vectores linealmente independientes.

Definición 2

Todas las combinaciones lineales $f_{\{\alpha_1,\dots\alpha_n\}} \equiv \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \ldots + \alpha_n f_n,\ \ f_i \in V, \alpha_i \in F$ forman un *espacio lineal* o *espacio vectorial*. A cada combinación $f_{\{\alpha_1,\dots\alpha_n\}}$ se le denomina *elemento* ó *vector* del espacio lineal ó vectorial.

Cuando F es el campo de números reales $\mathbb{R}$ o el campo de números complejos $\mathbb{C}$ se tiene la denominación:

- Si $\alpha_i \in \mathbb{R} \Rightarrow$ *Espacio lineal Real*
- Si $\alpha_i \in \mathbb{C} \Rightarrow$ *Espacio lineal Complejo*

Notación

$$V_n = \langle f_1, f_2, ..., f_n \rangle \quad \equiv \quad \text{Espacio Lineal}$$

- dim $V_n = n$ = dimensión del espacio lineal: número máximo de elementos linealmente independientes en el espacio lineal V_n
- A cualquier conjunto $\{f_1, f_2, \dots f_n\}$ de vectores linealmente independientes en V_n se le llama una *base* del espacio lineal V_n.
- Por construcción tenemos que cualquier elemento $f \in V_n$ tiene la siguiente representación:

$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_i\,,\ f_i \text{ son } n \textit{ vectores} \text{ linealmente independientes}$$

- A los coeficientes $\alpha_i \in \mathbb{C}$ se les denomina *componentes* o *proyecciones* del vector f en la base $\{f_1, f_2, \dots f_n\}$.

- En particular, si $f, g \in V_n$ entonces es evidente que $f + g \in V_n$

Un ejemplo de espacio vectorial de dimensión finita es el espacio de polinomios de grado $\leq n$.
Una notación común para este espacio es

$$\mathcal{P}_n = \langle 1, x, x^2, x^3, \ldots x^n \rangle; \quad \dim \mathcal{P}_n = n + 1 \,.$$

2.2 Espacio Vectorial Normado

Consideremos ahora un *Espacio Vectorial Normado*[1]. Es decir, un espacio lineal con una operación de producto interno entre sus elementos. Para esto requerimos introducir el siguiente concepto de *producto escalar*.

2.2.1 Producto escalar

Por definición el producto escalar es una función de valor complejo $(\cdot, \cdot)$ de $V \times V$ a $\mathbb{C}$. El producto escalar pone en correspondencia a dos vectores del espacio lineal V con un escalar del campo complejo $\mathbb{C}$

$$(a, b) \to \lambda \,, \qquad a, b \in V,\, \lambda \in \mathbb{C}$$

Se usa la notación (a, b) o $\langle a, b \rangle$ para denotar al producto escalar de los vectores a y b. La definición precisa del producto escalar incluye los siguientes atributos:

- $(f, f) \geq 0,$ y $(f, f) = 0$ si y sólo si $f = \mathbf{0}$

[1]En matemáticas se denomina como *inner product space* (espacio con producto interno) a un espacio vectorial, real o complejo, con una operación llamada producto interno. El producto interno de dos vectores en el espacio es un escalar denotado como (a, b) que permite introducir propiedades geométricas como longitudes, ángulos entre vectores, ortogonalidad etc. que generalizan la noción familiar del espacio vectorial Euclideano. Otra denominación para estos espacios es la de *normed linear spaces*.

- $(f_1 + f_2, f_3) = (f_1, f_3) + (f_2, f_3)\ \forall f_1, f_2, f_3 \in V$
- $(\alpha f_1, f_2) = \alpha(f_1, f_2),\ \forall f_1, f_2 \in V,\ \alpha \in \mathbb{C}$
- $(f_2, f_1) = (f_1, f_2)^*\ ,\ \forall f_1, f_2 \in V$

Definición: Un espacio vectorial (lineal) normado es un espacio vectorial (lineal) con producto escalar[2]

Definiciones

- Norma[3]

$$\text{Si } (f, f) \equiv N^2 \geq 0\,, \quad N \equiv ||f|| = \sqrt{(f, f)}$$
$$N = \text{ Norma del vector } f\,.$$

Nota: no siempre se tiene que $(f, f) \geq 0$. Por ejemplo en el espacio real de dos dimensiones con vectores $\vec{a} = (a_x, a_y)$, *i.e.* $(\vec{a} = a_x e_x + a_y e_y;\ a_x, a_y \in \mathbb{R},\ (e_x, e_x) = (e_y, e_y) = 1, (e_x, e_y) = 0)$ podemos definir las normas:

$$(\vec{a}, \vec{a}) = a_x^2 \pm a_y^2 \qquad \begin{cases} +\,\text{Espacio Euclidiano} \\ -\,\text{Espacio de Minkowski} \end{cases}$$

2.2.2 Ortogonalidad

Si para dos vectores no-nulos $f, g \in V,\ f, g \neq \mathbf{0}$ se cumple que

$$(f, g) = 0,$$

se dice que los vectores f, g son ortogonales.

Tarea Demuestre la siguiente desigualdad del triángulo (desigualdad de Cauchy-Buniakovski):

$$||f + g|| \leq ||f|| + ||g||$$

[2]A un espacio vectorial V equipado con un producto escalar que satisface las propiedades anteriores es un espacio pre-Hilbertiano.

[3]En análisis funcional, una semi norma es una norma de un espacio vectorial que no necesita ser positiva definida.

2.2.3 Producto vectorial

Por otro lado, para un espacio lineal podemos introducir otra regla de composición, según la cual el producto de dos vectores cualquiera da como resultado otro vector del mismo espacio vectorial. Esta regla (o producto vectorial) es una operación binaria de $V \times V$ a V, que pone en correspondencia a dos vectores $a, b \in V$ con otro vector $c \in V$ del espacio lineal. Podemos denotar este producto como

$$[a, b] \to c\,, \qquad a, b, c \in V$$

Un espacio lineal con producto vectorial se llama *álgebra*.

En particular, cuando el producto vectorial entre dos elementos del espacio $a, b \in V$ esta definido por el conmutador $[a, b] \equiv ab - ba$, tenemos un Algebra de Lie[4].

2.3 Noción de Operador

Un operador A en un espacio vectorial es una función que transforma un vector dado del espacio $f \in V$ en otro vector esencialmente diferente[5]. Un operador transforma cada vec-

[4]Un álgebra de Lie $\mathcal{A}$ es un espacio vectorial V_n (real o complejo) con una ley de composición (o multiplicación) entre vectores $[a, b] \to c\,,$ $a, b, c \in V_n$ con las propiedades

$$[\alpha a + \beta b, c] = \alpha[a, c] + \beta[b, c]\,,\ [b, a] = -[a, b]\,,$$

$$[a, [b, c]] + [b, [c, a] + [c, [a, b]] = 0\,,$$

en donde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ (o $\mathbb{C}$). Si $\{x_k |\, k = 1 \ldots n\}$ es una base de V_n, entonces las relaciones de conmutación básicas

$$[x_i, x_j] = \mathcal{C}_{ijk}\, x_k\,, \quad i, j, k = 1 \ldots n\,,$$

definen completamente el álgebra. Las constantes $\mathcal{C}_{ijk}$ se llaman *constantes de estructura* del álgebra de Lie.

[5]A diferencia de las transformaciones de cambio de base que no cambian el vector sobre el que actúan, sólo cambian su representación.

tor $f \in V$ del espacio en un vector $g \in V'$ de otro espacio vectorial:

$$Af = g, \quad f \in V, g \in V' .$$

También denotaremos la acción del operador A en el espacio lineal V como

$$A\colon f \to g .$$

- Espacios invariantes

Sea V un espacio lineal. En el caso en que:

$$Af \in V , \qquad \text{para } \forall f \in V ,$$

decimos que el operador A *actúa* en V. Por definición:

V es un espacio invariante de A, si $\forall f \in V \Rightarrow Af \in V$

- Linearidad. Se dice que A es un operador *lineal* si se cumple que

$$A(\alpha f + \beta g) = \alpha Af + \beta Ag , \qquad f, g \in V_n , \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C}.$$

Ejemplo

Un ejemplo de espacio vectorial es aquel que esta subtendido por todos los monomios $f_n = x^n , n = 0, 1, \ldots \infty$. Es un espacio vectorial de dimensión infinita

$$\mathcal{P}_\infty = \langle 1, x, x^2, x^3 \ldots x^n \ldots \rangle$$

En general, los elementos de este espacio son funciones analíticas de x (particularmente polinomios en x de grado arbitrario:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k x^k \in \mathcal{P}_\infty , \quad \alpha_k \in F .$$

Los coeficientes α_k son elementos del campo de número reales $F = \mathbb{R}$ o del campo de números complejos $F = \mathbb{C}$.

Los operadores más naturales que actúan sobre este espacio son

$$A = x\,, (\text{ operador de multiplicación}) \Rightarrow A\,f_n = f_{n+1}\,,$$
$$A = \frac{d}{dx}\,, (\text{ operador de diferenciación}) \Rightarrow A\,f_n = n\,f_{n-1}\,,$$

$$(f_n = x^n \text{ : elementos de la base de monomios})\,.$$

Estos operadores son lineales.

Ejemplos de Operadores

1. Existe un operador que actúa en $\mathcal{P}_\infty$ definido como:

$$A = \sum_{i=0}^{n} a_i(x)\frac{d^i}{dx^i}\,,$$

en donde los coeficientes $a_i(x)$ son funciones contínuas en algún intervalo de la variable x. Este operador es un *operador diferencial lineal*[6] de orden n

2. Otro operador (integral) esta definido como:

$$Af(x) \equiv \int_G K(x,y)\,f(y)\,dy\,,\ K(x,y) = \text{Kernel (núcleo)}$$

en donde G es el dominio que puede ser un intervalo, la semilínea real o la línea real completa.

[6]Un operador diferencial lineal es una combinación lineal de operadores diferenciales básicos con funciones diferenciables como coeficientes. Un operador diferencial lineal es un operador lineal, ya que mapea sumas a sumas y el producto por un escalar al producto por el mismo escalar, *i.e.* $A(\alpha f + \beta g) = \alpha A(f) + \beta A(g)$.

3. Se define el operador de translación (shift operator) como:

$$T_\delta = \mathrm{e}^{\delta \frac{d}{dx}}, \quad \left(\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{d^k}{dx^k} \right) .$$

Tarea Demuestre que $\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}} f(x) = f(x+1)$, y más generalmente que $\mathrm{e}^{\delta \frac{d}{dx}} f(x) = f(x+\delta)$.

2.3.1 Valores de Expectación

Es natural introducir un objeto escalar asociado con un operador A y un vector f:

$$\langle A \rangle_f \equiv (f, Af) .$$

Se llama *valor de expectación del operador A* con respecto del vector f (llamado, en inglés, *correlator* o *average value*).

2.4 Vectores y Valores Propios

Se dice que un vector f es un vector propio (autofunción, eigenfunción) de un operador (lineal) A con valor propio (autovalor, eigenvalor) λ si se cumple que

$$\boxed{Af = \lambda f} \tag{2.1}$$

El problema espectral es: dado un operador A, encontrar los posibles valores propios λ y sus respectivos vectores propios f.

¿Qué tipo de condiciones de frontera podemos tener?

1. Si A es una matriz de tamaño finito, no hay condiciones de frontera necesarias. Además, el espectro de eigenvalores es discreto y finito, (A actúa en un espacio de dimensión finita).

2. Si A es un operador diferencial, éste actúa siempre en un espacio de dimensión infinita;

   Un ejemplo es cuando el dominio de las funciones f sobre las que actúa el operador diferencial, es un intervalo $G = [a, b]$ con la condición de frontera $f(a) = f(b) = 0$.

   Otro ejemplo es cuando $G = [0, \infty)$ con la condición de frontera

$$\int_0^\infty f^2(x)dx < \infty\,.$$

   Un tercer ejemplo es cuando $G = (-\infty, \infty)$ con la condición de frontera

$$\int_{-\infty}^\infty f^2(x)dx < \infty\,.$$

El problema físico dicta las condiciones de frontera.

Comentario:

Cuando $A = \hat{H}$ (Hamiltoniano) el problema espectral es la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}\psi(x) = E\,\psi(x)\,,$$

con las condiciones de frontera

$$\int_G |\psi(x)|^2\,dx < \infty\,,$$

implica que sólo existen soluciones para algunos valores particulares de los valores propios E.

2.5 Hermiticidad

A continuación vamos a introducir el concepto de Hermiticidad.

- Sean f, g vectores $\in V$ y A un operador que actúa en V
- Consideremos el producto escalar (f, Ag)
- En general $(f, Ag) \neq (Af, g)$
- Suponemos que existe el operador $A^\dagger$ tal que:

$$(Af, g) = \left(f, A^\dagger g\right) .$$

Este operador $A^\dagger$ se llama el operador *Conjugado Hermitiano* (o *Adjunto*) del operador A.

Definición: El operador A es *Hermitiano* o *Autoadjunto* si cumple que:

$$(Af, g) = (f, Ag) ,$$

es decir si[7]

$$A = A^\dagger .$$

Como consecuencia de la propiedad de hermiticidad obtenemos el siguiente teorema [8]:

[7]En matemáticas existe una diferencia entre operador Hermitiano y operador Autoadjunto. Un operador autoadjunto en un espacio vectorial complejo de dimensión infinita V con producto escalar $(\cdot, \cdot)$ (equivalentemente un operador Hermitiano en el caso de dimensión finita) es un mapeo lineal A (de V a si mísmo) que es su propio adjunto.

[8]El teorema es válido cuando el conjunto de eigenvalores del operador en cuestión no esta vacio. Un contraejemplo sencillo es el operador de posición $\hat{x}$ en el espacio de funciones reales de cuadrado integrable $L_2(\mathbb{R})$, $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$, el cual es Hermitiano pero no tiene ningún eigenvector. En la mecánica cuántica el problema de valores propios del operador de posición $\hat{x}$, $x\psi(x) = x_0\psi(x)$ se resuelve introduciendo la función δ de Dirac: $\psi(x) = \delta(x - x_0)$.

Teorema

Todos los valores propios de un operador Hermitiano son reales

Demostración del Teorema:

Supongamos que A es un operador Hermitiano con eigenvectores actuando sobre un espacio con producto escalar definido por

$$(f,g) = \int_G f(x)^* g(x)\, W(x)\, dx\,, \quad W(x) > 0 \in \Re, \text{ para } x \in G.$$

Consideremos ahora el problema espectral

$$Af = \lambda f\,,$$

y calculemos el producto escalar (valor de expectación)

$$\begin{aligned}(f, Af) &= \lambda (f,f)\,,\\ &= \int_G f^*(x)\, Af(x)\, W(x)\, dx\,.\end{aligned}$$

Ahora consideramos el complejo conjugado de la expresión anterior y, por simplicidad, vamos a suponer que f es un vector normalizado, i.e. $(f,f) = 1$.

$$\begin{aligned}\lambda^* &= \int_G f(x)(Af(x))^*\, W(x)\, dx\\ &= \int_G (Af(x))^*\, f(x) W(x)\, dx = (Af, f) = (f, Af)\\ &= \lambda\,,\end{aligned}$$

en donde usamos el hecho que A es un operador Hermitiano: $(Af, f) = (f, Af)$.

Una nota sobre simetría PT

La afirmación contraria del teorema anterior no es cierta: Si todos los valores propios de un operador son reales, esto no necesariamente significa que el operador es Hermitiano. Recientemente ha comenzado a crearse una teoría de operadores no-Hermitianos con espectros reales (teoría de operadores con simetría PT). Como ejemplo podemos mencionar un operador Hamiltoniano con potencial $V = i\,x^3$, i.e.

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + i\,x^3\,,$$

todas las *energías* son reales (D. Bessis, (1988)). Matemáticamente es muy complicado demostrar esta afirmación. Otro ejemplo es el de un operador Hamiltoniano con potencial $V = -x^4$ para el cual el espectro es real pero el movimiento es infinito: la partícula viene a infinito en un intervalo de tiempo finito.

Regresando a la noción de Hermiticidad vamos a hacer algunas definiciones.

Definición:
Si $\forall\, f \in V_n\,, \quad \hat{\mathbb{1}} f = f$ entonces:

$$\hat{\mathbb{1}} = \text{Operador Identidad}$$

Definición (de *Operador Positivo*):
A es un operador positivo si $\forall f \in V$ (V espacio en donde el operador A actúa), entonces

$$(Af, f) \geq 0$$

Teorema 1. El operador A es positivo si A es Hermitiano.

Teorema 2. Si A es Hermitiano, entonces

Las autofunciones que corresponden a autovalores diferentes son ortogonales.

Demostración:

Sean $\phi_{1,2}$ eigenfunciones con eigenvalores $\lambda_{1,2}$ respectivamente, con $\lambda_1 \neq \lambda_2$

$$A\phi_1 = \lambda_1\phi_1\,,$$
$$A\phi_2 = \lambda_2\phi_2\,.$$

Definamos:

$$\lambda_1\left(\phi_1,\phi_2\right) = \left(\lambda_1\phi_1,\phi_2\right) = \overbrace{\left(A\phi_1,\phi_2\right) = \left(\phi_1,A\phi_2\right)}^{A \text{ es Hermitiano}} = \left(\phi_1,\lambda_2\phi_2\right) = \lambda_2\left(\phi_1,\phi_2\right)\,,$$

por lo tanto $\left(\lambda_1-\lambda_2\right)\left(\phi_1,\phi_2\right)=0$ y como $\lambda_1 \neq \lambda_2$

$$\Rightarrow \left(\phi_1,\phi_2\right) = 0\,,$$

es decir que ϕ_1 y ϕ_2 son ortogonales.

Nota: Un eigenestado con eigenvalor $\lambda_0 = 0$ se le llama *modo cero* (*zero mode*)[9].

2.6 Degeneración

En el problema espectral puede existir un cierto número $k > 1$ de autofunciones con el mismo eigenvalor

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = ... = \lambda_k$$

A este fenómeno se le llama *degeneración*.

- Si k es finito, se dice que la degeneración es finita.
- Si k es infinito, se tiene que la degeneración es infinita.

[9]Este tipo de eigenestados es muy importante para la formulación de la *Mecánica Cuántica Supersimétrica* (SUSY QM).

En general las eigenfunciones degeneradas $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \ldots, \phi_k$ no necesariamente son ortogonales, pero siempre son linealmente independientes. Usando el procedimiento de Gram-Schmidt (ver abajo) podemos ortogonalizar estas funciones.

La *degeneración* es un fenómeno físico importante que aparece en muchas ocasiones. Por ejemplo, todos los estados excitados del átomo de hidrógeno tienen una degeneración finita. Otro ejemplo, para el caso de un electrón en un campo magnético uniforme y constante aparece una degeneración infinita.

2.7 Espacio Funcional

Tomemos una secuencia de funciones (reales) linealmente independientes

$$f_1(x), f_2(x), ..., f_n(x)\,, \qquad x \in G = [a, b] \quad \text{(intervalo)}$$

con producto escalar

$$(f, g) = \int_G f(x)\, g(x)\, W(x)\, dx\,,$$

en donde a la función $W(x)$ se le llama *función de peso* o medida. Esta función debe ser positiva, $W(x) > 0\,, x \in G = [a, b]$, excepto quizá en los puntos de la frontera $x = a, x = b$. El ejemplo más típico es $W(x) = 1$ es un caso particular entre los más importantes. Es claro que es necesario seleccionar la función de peso $W(x)$ de tal forma que todos los productos escalares existan y sean finitos,

$$\int_G f(x)\, g(x) W(x)\, dx < \infty\,.$$

Ejemplo: sí $W(x) = 1$ y $G = [0, 1]$ para las funciones $f_n(x) = x^n$ todas las integrales son finitas.

Nota: Queremos enfatizar: usualmente seleccionamos como función $f_1(x)$ como una función positiva, $f_1(x) \geq 0$ dentro del dominio $x \in G$. Es decir, la primera función $f_1(x)$ no tiene nodos excepto en las fronteras.

2.7.1 Espacio de Hilbert

Consideremos un espacio lineal de funciones V con producto escalar[10] definido por

$$\text{s.p.} = \int_G \phi(x)^* \psi(x)\, W(x)\, dx < \infty\,, \tag{2.2}$$

$$\phi(x), \psi(x) \in V\,, \quad x \in G \quad (\text{dominio})\,,$$

$$W(x) = \text{Función de peso}; \quad W(x) \geq 0 \quad x \in G\,.$$

El conjunto de funciones $\phi(x) \in V$ forma un espacio lineal de funciones de cuadrado integrable denominado *Espacio de Hilbert* [11] $\big(\mathcal{L}^2_W(x)\big)$, o más correctamente $\big(\mathcal{L}^2(x, W)\big)$.

Caso particular

$$\int_{\Re^d} |f(\mathbf{x})|^2 \; d\mathbf{x} < \infty\,.$$

Un hecho muy importante es que $1 \notin \mathcal{L}^2(x)$ cuando el dominio G es infinito.

2.8 Procedimiento de Gram-Schmidt

Algo importante en el estudio de los espacios lineales es la selección de una *base* apropiada. Es más conveniente trabajar con bases ortogonales. Por eso se introduce el concepto de cambio de base a una base ortogonal, o procedimiento de ortogonalización:

[10] s.p. = scalar product.

[11] En realidad estas condiciones solo definen un espacio pre-Hilbert. Para definir un espacio de Hilbert se requiere que éste sea completo (cerrado). Completo aqui significa un sistema $\{\varphi_j\}_0^\infty \subset V$ tal que $\nexists g \in V \backslash \{0\}$ tal que g sea perpendicular a $\varphi_j \; \forall j$.

2.8.1 Bases Ortogonales (Cambio de Base)

$$\{f_0, f_1, f_2, \ldots\} \to \{\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \ldots\} \qquad \text{tal que}$$

$$(\varphi_i, \varphi_j) = c_i \delta_{ij}$$

$$\text{símbolo de Kronecker:} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad i = j\,, \\ 0 & \text{si} \quad i \neq j\,. \end{cases}$$

2.8.2 Procedimiento de Gram-Schmidt

(No es sólo es para funciones)

$$\text{Sea} \quad f_0, f_1, f_2, \ldots f_n \quad \text{una base arbitraria}$$

1. f_0 es un "primer"vector[12]. Preferiblemente "*normalizado*":

$$\varphi_0 \equiv \frac{f_0}{||f_0||} \quad \Rightarrow \quad (\varphi_0, \varphi_0) = 1$$

2. Queremos construir un segundo vector φ_1 ortogonal a φ_0, es decir, tal que

$$(\varphi_0, \varphi_1) = 0\,.$$

Podemos probar el siguiente *Ansatz*[13] para φ_1:

$$\varphi_1 = f_1 - a\varphi_0\,,$$

es decir que proponemos un vector formado como combinación lineal del primer vector φ_0 y la segunda función de la base f_1. Entonces

$$(\varphi_0, \varphi_1) = (\varphi_0, f_1 - a\varphi_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad a = (\varphi_0, f_1)\,,$$

[12]En algunas ocasiones acostumbramos empezar la enumeración de los elementos por el elemento con subíndice *cero*.

[13]Ansatz:(Alemán, plural: Ansätze) Un Ansatz es una solución estimada, prefigurada o adivinada, a una ecuación que describe un problema físico y/o matemático.
El signo $(-)$ es por conveniencia futura.

es decir

$$\varphi_1 = f_1 - (\varphi_0, f_1)\varphi_0 \,.$$

Normalizando esta nueva función obtenemos:

$$\varphi_1 = \frac{f_1 - (\varphi_0, f_1)\varphi_0}{||f_1 - (\varphi_0, f_1)\varphi_0||} \,,$$

Así, el vector φ_1 se obtiene de restar a la función f_1 la *componente (o proyección)* de f_1 en la dirección del *vector* (unitario) φ_0 para luego normalizarlo.

3. Siguiendo con este procedimiento buscamos un tercer vector φ_2 ortogonal a φ_0 y a φ_1, es decir un vector que cumpla las condiciones

$$(\varphi_2, \varphi_1) = 0 \,, \quad (\varphi_2, \varphi_0) = 0 \,.$$

Nuevamente proponemos el siguiente Ansatz:

$$\varphi_2 = f_2 - a\varphi_0 - b\varphi_1 \,.$$

Tarea Determinar la tercera función φ_2, tal que $(\varphi_2, \varphi_0) = 0$, $(\varphi_2, \varphi_1) = 0$, y $(\varphi_2, \varphi_2) = 1$.

De los resultados anteriores podemos fácilmente escribir una fórmula general para la n-ésima función ortonormal de Gram-Schmidt :

$$\varphi_n = \frac{f_n - \sum_{k=0}^{n-1} (\varphi_k, f_n)\, \varphi_k}{\left|\left| f_n - \sum_{k=0}^{n-1} (\varphi_k, f_n)\, \varphi_k \right|\right|} \,. \tag{2.3}$$

2.8.3 Notación para Bases Ortogonales

Es común representar una base ortonormal mediante la notación $\{e_i\}$ con

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} \,, \quad \text{entonces} \quad f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, e_i \,, \quad \forall f \in V_n \,.$$

Así, el producto escalar de dos vectores f_1, f_2 del espacio lineal V_n:

$$f_1 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(1)} e_i \,, \quad f_2 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(2)} e_i \,,$$

es simplemente

$$(f_1, f_2) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(1)} \alpha_i^{(2)} \,.$$

2.9 Polinomios Ortogonales

Un sistema de funciones que aparecen frecuentemente es el conjunto de monomios

$$1, x, x^2, x^3 \ldots . x^n, \ldots \,. \tag{2.4}$$

En esta sección vamos a explorar los conjuntos de polinomios ortogonales construidos a partir del conjunto de monomios (2.4) y productos escalares definidos con diferentes funciones de peso $W(x)$.

2.9.1 Polinomios de Legendre

En primer lugar, con la secuencia de funciones *l.i.* $\{f_n(x) = x^n, n = 0, 1 \ldots\}$ y un producto escalar definido por la función de peso $W(x) = 1$ en el dominio $G = [-1, +1]$, nos preguntamos ¿cuál es el sistema de funciones ortonormales $\varphi_n(x)$?

De acuerdo con el procedimiento de Gram Schmidt seleccionamos la primera función[14] y la normalizamos

$$f_0(x) = 1 \,, \qquad ||f_0||^2 = \int_{-1}^{+1} dx = 2 \;\Rightarrow$$

$$\varphi_0(x) = \frac{f_0(x)}{||f_0(x)||} = \frac{1}{\sqrt{2}} \,.$$

[14]El procedimiento no indica cuál es el orden en que se deben elegir las funciones base para construir la base ortonormal. Por simplicidad tomamos la primera función de la secuencia (de grado mas bajo), luego la segunda, etc. Como veremos más adelante, este orden nos llevará a la construcción de polinomios ortogonales.

Ahora determinamos la segunda función usando la fórmula

$$\varphi_1 = \frac{f_1 - (\varphi_0, f_1)\varphi_0}{||f_1 - (\varphi_0, f_1)\varphi_0||}\,,$$

con $f_1 = x$. Lo primero que observamos es que $(\varphi_0, f_1) = 0$:

$$(\varphi_0, f_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^{+1} x\, dx = 0\,,$$

ya que el integrando es una función *impar* de x que se integra sobre un dominio simétrico. Por lo tanto se tiene que

$$\varphi_1 = \frac{f_1}{||f_1||}\,, \qquad f_1 = x\,,$$

y como

$$||f_1||^2 = \int_{-1}^{+1} x^2\, dx = \frac{x^3}{3}\bigg|_{-1}^{+1} = \frac{2}{3}\,,$$

$$\Rightarrow \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{3}{2}}\, x\,.$$

Para la siguiente función *par* podemos inmediatamente proponer (hasta una normalización)

$$\varphi_2(x) = x^2 + a\,,$$

ya que, por argumentos de simetría, no aparece el término lineal en x.

En la Tabla 2.1 se muestran los primeros polinomios de Legendre obtenidos mediante el procedimiento de Gram-Schmidt descrito en esta sección[15].

[15]En muchos libros de texto los polinomios de Legendre $P_n(x)$ $(n = 0, 1, 2\ldots)$ están definidos con normalización diferente: $\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)\, dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$. La relación entre estas dos normalizaciones es $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}}\, P_n(x)$ (ver la Tabla 2.1). Es necesario mencionar que como resultado del procedimiento de Gram-Schmidt aparece una relación de recurrencia para los polinomios de Legendre:

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x).$$

Tabla 2.1: Los primeros polinomios ortogonales de Legendre calculados de acuerdo con el procedimiento de Gram-Schmidt.

$$
\begin{aligned}
\varphi_0 &= \sqrt{\tfrac{1}{2}} \\
\varphi_1 &= \sqrt{\tfrac{3}{2}}\, x \\
\varphi_2 &= \sqrt{\tfrac{5}{2}}\, \tfrac{1}{2}\, (3\,x^2 - 1) \\
\varphi_3 &= \sqrt{\tfrac{7}{2}}\, \tfrac{1}{2}\, (5\,x^3 - 3\,x) \\
\varphi_4 &= \sqrt{\tfrac{9}{2}}\, \tfrac{1}{8}\, (35\,x^4 - 30\,x^2 + 3) \\
\varphi_5 &= \sqrt{\tfrac{11}{2}}\, \tfrac{1}{8}\, (63\,x^5 - 70\,x^3 + 15\,x) \\
\varphi_6 &= \sqrt{\tfrac{13}{2}}\, \tfrac{1}{16}\, (231\,x^6 - 315\,x^4 + 105\,x^2 - 5) \\
\varphi_7 &= \sqrt{\tfrac{15}{2}}\, \tfrac{1}{16}\, (429\,x^7 - 693\,x^5 + 315\,x^3 - 35\,x)
\end{aligned}
$$

Tarea ¿Cuál es la forma general de la n-ésima función de Gram-Schmidt $\varphi_n(x)$, con $f_n(x) = x^n$, $W(x) = 1$, y $G = [-1, +1]$? *Hint: El dominio G sugiere que se usen funciones trigonométricas.*

Tarea Considere la secuencia de monomios $\{x^n, x^{n+1}, \ldots\}$ con $W(x) = 1$ y $G = [-1, +1]$ y calcule los primeros tres polinomios ortogonales $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2$ usando el procedimiento de Gram-Schmidt.

Demuestre que estos tres polinomios no están relacionados con los polinomios de Legendre $\varphi_n, \varphi_{n+1}, \varphi_{n+2}$.

2.9.2 Polinomios de Hermite

Ahora consideremos el problema de encontrar las funciones ortogonales a partir de la secuencia $\{1, x, x^2, x^3 \ldots\}$ pero con la función de peso Gaussiana

$$W(x) = e^{-x^2}\,, \qquad x \in (-\infty, +\infty)\,. \tag{2.5}$$

Una vez más, siguiendo el procedimiento de Gram-Schmidt elegimos la primera función como

$$\varphi_0 = \frac{f_0}{||f_0||}\,, \qquad (f_0 = 1)\,.$$

En este caso[16]

$$||f_0||^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}\,,$$

y por tanto

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\,.$$

La segunda función es

$$\varphi_1(x) = \frac{\tilde{\varphi}_1}{||\tilde{\varphi}_1||}\,, \quad \text{donde} \quad \tilde{\varphi}_1 = x - (x, \varphi_0)\varphi_0\,,$$

pero $(x, \varphi_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, e^{-x^2} dx = 0$. Ahora sólo necesitamos $||\tilde{\varphi}_1||^2$:

$$||\tilde{\varphi}_1||^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, e^{-x^2} dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,.$$

Por lo tanto

$$\varphi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi}}\, x$$

Tarea: A partir de la secuencia de monomios $\{1, x, x^2, \ldots\}$ con $W(x) = e^{-x^2}$ y $G = (-\infty, +\infty)$ calcule los primeros tres polinomios ortogonales $\varphi_n(x)$ para $n = 1, 2, 3$.

Una relación muy útil al hacer cálculos es

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}\, e^{-x^2} dx = \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)\,,$$

en donde $\Gamma(x)$ es la función Gamma (ver Apéndice).

[16] La integral $I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$ la podemos calcular de manera directa con un truco:

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\, dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}\, dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx\, dy$$

$$= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{+\infty} e^{-r^2} r dr = 2\pi \left(-\frac{1}{2}\right) e^{-r^2}\Big|_0^{\infty} = \pi\,.$$

Por lo tanto $I = \sqrt{\pi}$.

Tabla 2.2: Los primeros polinomios ortogonales de Hermite obtenidos mediante el procedimiento de Gram-Schmidt, en donde hemos extraído un factor multiplicativo $1/\pi^{1/4}$ en todos los polinomios.

$\varphi_0 =$	1
$\varphi_1 =$	$\sqrt{2}\,x$
$\varphi_2 =$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\,(2\,x^2-1)$
$\varphi_3 =$	$\frac{\sqrt{3}}{3}\,x\,(2\,x^2-3)$
$\varphi_4 =$	$\frac{\sqrt{6}}{12}\,(4\,x^4-12\,x^2+3)$
$\varphi_5 =$	$\frac{\sqrt{15}}{30}\,x\,(4\,x^4-20\,x^2+15)$
$\varphi_6 =$	$\frac{\sqrt{5}}{60}\,(8\,x^6-60\,x^4+90\,x^2-15)$
$\varphi_7 =$	$\frac{\sqrt{70}}{420}\,x\,(8\,x^6-84\,x^4+210\,x^2-105)$

Tarea Consideremos la función de peso $W(x) = \mathrm{e}^{-x^4}$ y la secuencia de funciones $\{1, x, x^2, \ldots\}$ en la línea $x \in (-\infty, \infty)$.

Usando el procedimiento de Gram-Schmidt encuentre las primeras cuatro funciones ortogonales $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$, con la condición

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{i,j}\,.$$

Hint: considere las funciones (no-normalizadas)

$$\tilde{\varphi}_0 = 1\,, \tilde{\varphi}_1 = x + a\,, \tilde{\varphi}_2 = x^2 + bx + c\,\ldots$$

Solución:

Consideramos la primera función como

$$\phi_0 = \frac{\tilde{\varphi}_0}{||\tilde{\varphi}_0||} = \sqrt{\frac{2}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}}\,,$$

en donde la normalización es

$$||\tilde{\varphi}_0||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^4} dx = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\,.$$

Suponemos que $\tilde{\varphi}_1 = x + a$, e imponemos la condición $(\tilde{\varphi}_1, \varphi_0) = 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x+a)\, e^{-x^4} dx = 0 \Rightarrow a = 0\,,$$

entonces $\tilde{\varphi}_1 = x$. Por lo tanto

$$\varphi_1 = \frac{\tilde{\varphi}_1}{||\tilde{\varphi}_1||} = \sqrt{\frac{2}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}}\, x\,,$$

con

$$||\tilde{\varphi}_1||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\, e^{-x^4} dx = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)\,.$$

Consideramos $\tilde{\varphi}_2 = x^2 + bx + c$ y demandamos que

$$(\tilde{\varphi}_2, \varphi_0) = (\tilde{\varphi}_2, \varphi_1) = 0\,,$$

de donde obtenemos inmediatamente que $b = 0$ (por paridad),

$$(\tilde{\varphi}_2, \varphi_1) \propto \int_{-\infty}^{\infty} x\,(x^2+bx+c) e^{-x^4} dx = b \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^4} dx\,,$$

$$\Rightarrow b = 0\,,$$

luego

$$\begin{aligned}(\tilde{\varphi}_2, \varphi_0) &\propto \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + c) e^{-x^4} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^4} dx + c \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^4} dx \\ &= \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) + \frac{c}{2}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 0 \Rightarrow\end{aligned}$$

$$c = -\frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}\,.$$

La normalización es

$$||\tilde{\varphi}_2||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + c)^2\, e^{-x^4} dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x^4\, e^{-x^4} dx + \int_{-\infty}^{\infty} 2cx^2\, e^{-x^4} dx + \int_{-\infty}^{\infty} c^4\, e^{-x^4} dx$$

$$= \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) + c\,\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) + \frac{c^2}{2}\,\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = \frac{1}{8}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) - \frac{1}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)^2}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}\,,$$

y por tanto

$$\varphi_2 = \frac{1}{||\tilde{\varphi}_2||}\left(x^2 - \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}\right).$$

En el problema anterior, ¿Es posible construir dos funciones ortogonales de la forma:

$$\varphi = x^2 + A\,? \tag{2.6}$$

La respuesta es afirmativa: existen 2 polinomios cuadráticos φ_1, φ_2 ortogonales con la función de peso $W(x) = e^{-x^4}$.

¿Cuál es la función φ_3, tal que $(\varphi_3, \varphi_{1,2}) = 0$?

Solución:

$$\begin{aligned}(\varphi_1, \varphi_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + A_1)(x^2 + A_2)\, e^{-x^4} dx \\ &= \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) + (A_1 + A_2)\frac{1}{2}\,\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \\ &\quad + \frac{A_1 A_2}{2}\,\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 0\,, \\ \Rightarrow A_1 &= -\frac{\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) + \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) A_2}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) + \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) A_2}\,,\end{aligned}$$

con A_2 arbitraria.

En particular, si $A_2 = 0$ obtenemos las funciones:

$$\varphi_1 = x^2 - \frac{\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}\,, \quad \varphi_2 = x^2\,,$$

las cuales tienen, en $(-\infty, +\infty)$, dos ceros y un cero (de segundo orden), respectivamente.
Aquí, es más recomendable evitar funciones que, dentro del dominio, tengan ceros de orden mayor al primer orden, ver el Teorema de Sturm más adelante. Por esta razón excluimos esta solución.

Otra posible solución es $A_2 = -A_1$. Entonces tenemos

$$\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) - \frac{{A_1}^2}{2}\,\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 0 \;\Rightarrow\; A_1^2 \;=\; \frac{\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \;=\; \frac{1}{4},$$

en donde hemos usado la relación $\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) = \frac{1}{4}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)$, y entonces

$$\varphi_1(x) = x^2 + \frac{1}{2}\,, \quad \varphi_2(x) = x^2 - \frac{1}{2}\,,$$

con ningún y dos ceros, respectivamente, en $(-\infty, +\infty)$!

Luego, cualquier función impar es una función ortogonal a $\varphi_{1,2}$. La función más simple es

$$\varphi_3 \propto x\,,$$

que es una función con un cero. Por otra parte, la función $\varphi_0 = 1$ no es ortogonal ni a φ_1 ni a φ_2. Eventualmente las funciones $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ son ortogonales con la función de peso $W(x) = e^{-x^4}$.

Análogamente, si tenemos:

$$\varphi = x^4 + Ax^2 + B\,,$$

¿cuántas funciones ortogonales de este tipo podemos construir con la función de peso $W(x) = e^{-x^4}$? Daremos una respuesta a esta pregunta más adelante.

LECCIÓN 3

El Operador de Sturm-Liouville

3.1 Definición

El problema de Sturm-Liouville esta definido por la ecuación diferencial[1,2].

$$Lu = -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}u\right) + q(x)u = \lambda u\,, \tag{3.1}$$

en donde $p(x)$ y $q(x)$ son algunas funciones usualmente con condiciones $p(x) > 0$ y $q(x) \geq 0$, el dominio de definición del problema $x \in [0, \ell]$. El *operador de Sturm-Liouville* asociado es

$$L = -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}\right) + q(x)\,. \tag{3.2}$$

En la ecuación (3.1) λ es un eigenvalor del operador L, y $u = u(x)$ es el eigenvector correspondiente. El operador de Sturm-Liouville

[1]Esta forma del problema de eigenvalores es muy común en problemas físicos descritos por ecuaciones diferenciales de segundo orden.

[2]Jacques Charles Francois Sturm (Sept 29, 1803 - Dec 15, 1855) y Joseph Liouville (24 Mar 1809 - 8 Sept 1882) fueron matemáticos franceses.

es un operador lineal. Las eigenfunciones normalizadas forman una base ortonormal de un espacio vectorial.

En particular, si $p(x) = 1$ identificamos inmediatamente el operador de Sturm-Liouville con el operador de Schrödinger:[3]

$$L = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$$

Operador de Schrödinger (Hamiltoniano) — *potencial*

3.1.1 Condiciones de frontera

En este problema se imponen condiciones de frontera sobre la función y su primera derivada en la forma general

$$h_1 u(0) + h_2 u'(0) = 0\,,$$
$$H_1 u(\ell) + H_2 u'(\ell) = 0\,,$$

con h_1, h_2, H_1 y H_2 constantes reales.

Por ejemplo, si se tiene que $h_2 = H_2 = 0$, entonces

$$u(0) = u(\ell) = 0\,,$$

como en el problema cuántico del pozo cuadrado infinito, ó como en el caso de las oscilaciones de una cuerda con los extremos fijos.

Otra forma de expresar las condiciones de frontera que aparecen en muchos problemas de interés físico es[4]

$$p(0)\,u(0)\,u'(0) = p(\ell)\,u(\ell)\,u'(\ell) = 0\,, \tag{3.3}$$

ya que es muy común que p, u o su derivada u' desaparezcan en las fronteras.

---

[3]En Mecánica Cuántica tenemos una constante $\dfrac{\hbar^2}{2m}$ enfrente del término de segunda derivada $\dfrac{d^2}{dx^2}$. Usualmente utilizamos un sistema de unidades en donde $\hbar = 1$ y $m = \frac{1}{2}$.

[4]Una forma particularmente importante de las condiciones de frontera es requerir que $vpu'|_0 = vpu'|_\ell$ (para u, v soluciones del operador de Sturm-Liouville). En este caso se cumple el Teorema: $\int_0^\ell v\,L\,u\,dx = \int_0^\ell u\,L\,v\,dx$.

3.1.2 Integral de Energía

Necesitamos introducir la noción de *integral de energía*.

$$(Lu, u) = \int_0^\ell \left[p \left(u'\right)^2 + qu^2 \right] dx \,. \tag{3.4}$$

Tarea Demuestre que el valor de expectación (Lu, u) para el operador de Sturm-Liouville (3.2) puede escribirse en la forma (3.4).

Es posible demostrar que la ecuación de Sturm-Liouville (3.1) es en realidad la ecuación de Euler-Lagrange para u que hace que la funcional (3.4) tome un valor estacionario.

Tarea Demuestre la afirmación anterior.

3.1.3 Hermiticidad

El operador de Sturm-Liouville $L_{\text{S-L}}$ es *autoadjunto*. Vamos a demostrar explícitamente que $(Lv, u) = (v, Lu)$:

$$(v, Lu) = \int_0^\ell \left[-v \left(pu'\right)' + vq\, u \right] dx \,.$$

Es claro que el término $vq\, u$ es autoadjunto (los elementos conmutan y por lo tanto podemos escribir dicho término como $qv\, u$).

Para demostrar la hermiticidad del operador de Sturm-Liouville nuestra tarea es, a *grosso modo*, cambiar el operador p de lugar. Veamos en detalle el primer término: Integrando por partes se obtiene:

$$-\int_0^\ell v \left(pu'\right)' \, dx \;=\; -\int_0^\ell v \, d\left(pu'\right) \;=\; \cancelto{0}{-v\, pu'\Big|_0^\ell} + \int_0^\ell pu'v' \, dx \,.$$

El primer término desaparece por condiciones de frontera, $v(\ell)p(\ell)u'(\ell) = v(0)p(0)u'(0)$. El segundo término es:

$$\int_0^\ell pu'v' \, dx \;=\; \int_0^\ell pv' \, du \;=\; \cancelto{0}{pv'u\Big|_0^\ell} - \int_0^\ell (pv')' u \, dx \quad . \#$$

3.1.4 Wronskiano

Consideremos una secuencia de funciones $f_1(x), f_2(x), \ldots, f_n(x)$. El *Wronskiano*[5] por definición es:

$$W(x) = \det \begin{vmatrix} f_1(x) & f_2(x) & f_3(x) & \ldots & f_n(x) \\ f_1'(x) & f_2'(x) & f_3'(x) & \ldots & f_n'(x) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_1^{(n-1)}(x) & f_2^{(n-1)}(x) & f_3^{(n-1)}(x) & \ldots & f_n^{(n-1)}(x) \end{vmatrix} \tag{3.5}$$

Utilidad del Wronskiano:

- Si $f_1(x), f_2(x), ..., f_n(x)$ son linealmente independientes $\Rightarrow$ $W(x) \neq 0$.
- Cuando las funciones $f_i(x)$ son soluciones de una ecuación diferencial lineal, el Wronskiano puede encontrarse explícitamente usando la fórmula de Abel[6], aun cuando las funciones f_i no se conozcan explícitamente.
- Para el problema de Sturm-Liouville, cuando no fijamos condiciones de frontera, se tiene que para cualquier λ, existen dos soluciones linealmente independientes $L\phi_{1,2} = \lambda\phi_{1,2}$. Se dice que $\{\phi_1, \phi_2\}$ es el "Sistema fundamental de soluciones"ó "solución fundamental"[7] .

[5]En matemáticas, el Wronskiano es un determinante introducido por Józef Hoene-Wronski (1812) y nombrado por Thomas Muir (1882, Capítulo XVIII). Se usa en el estudio de ecuaciones diferenciales.

[6]Para una ecuación diferencial de segundo orden $y'' + p(x)y' + q(x)\,y = 0$ la fórmula de Abel permite calcular el Wronskiano del sistema fundamental como $W(x) = C \exp\left(- \int p(x)\,\mathrm{d}x \right)$, en donde C es una constante dependiente de las condiciones iniciales. Nótese aquí que la función $p(x)$ no es la función que aparece en el operador de Sturm-Liouville.

[7]Para el caso de un operador diferencial de segundo orden

$$a(x)\,f''(x) + b(x)\,f'(x) + c(x)\,f(x) = g(x)\ ,$$

un teorema principal nos dice que sólo existen dos soluciones linealmente independientes, f_1, f_2.

Es importante mencionar que, en este caso, para un eigenvalor λ dado, el problema de Sturm-Liouville es un problema de una ecuación diferencial lineal de 2o orden y, entonces, tenemos dos soluciones linealmente independientes asociadas con ese mismo valor de λ.

- En el caso del problema de Sturm-Liouville (3.1) aparece una nueva propiedad:

$$p(x)W\left(\phi_1(x),\phi_2(x)\right) \;=\; p\left(0\right)W\left(\phi_1\left(0\right),\phi_2\left(0\right)\right)\;,$$

llamada *Identidad de Liouville-Ostrogradsky.*

Teorema: En el problema de Sturm-Liouville,

$$p(x)W(x) = \text{const} \;\neq\; 0\,,$$

en donde $W(x) = W(\phi_1(x),\phi_2(x))$ es el Wronskiano del sistema fundamental $\{\phi_1(x),\phi_2(x)\}$.

En efecto, si $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ son dos soluciones *l.i.* de la ecuación de Sturm-Liouville (3.1) correspondientes al mismo eigenvalor λ:

$$\begin{aligned} -\big(p(x)\,\phi_1'(x)\big)' + q(x)\phi_1(x) &= \lambda\phi_1(x), \qquad (3.6)\\ -\big(p(x)\,\phi_2'(x)\big)' + q(x)\phi_2(x) &= \lambda\phi_2(x)\,, \end{aligned}$$

multiplicando la primera ecuación por $\phi_2(x)$, la segunda ecuación por $\phi_1(x)$ y restando las ecuaciones se obtiene

$$\phi_1(x)\big(p(x)\,\phi_2'(x)\big)' - \phi_2(x)\big(p(x)\,\phi_1'(x)\big)' = 0\,,$$

ó, equivalentemente

$$\big[p(x)\,\big(\phi_1(x)\,\phi_2'(x) - \phi_2(x)\,\phi_1'(x)\big)\big]' = 0\,. \qquad (3.7)$$

que implica que[8]

$$p(x)W(\phi_1(x),\phi_2(x)) = \text{const.} \qquad (3.8)$$

[8]Si ϕ_1, ϕ_2 son linealmente dependientes (i.e. $\phi_2(x) = c\phi_1(x)$), con c una constante, entonces $W(\phi_1(x),\phi_2(x)) = 0$.

En el caso en que $p(x) = 1$ (la ecuación de Schrödinger) se infiere que:

$$W\left(\phi_1(x), \phi_2(x)\right) \;=\; \text{constante (dependiente de } \lambda)\,.$$

- No depende de las condiciones de frontera
- Es una propiedad fundamental del sistema

Consecuencia inmediata: si conocemos una de las dos soluciones, por ejemplo $\phi_1(x)$, podemos conocer la otra solución:

Como el Wronskiano es una constante (cuando $p(x) = 1$)

$$W(x) = \det \begin{vmatrix} \phi_1(x) & \phi_2(x) \\ \phi_1'(x) & \phi_2'(x) \end{vmatrix} = \phi_1(x)\phi_2'(x) - \phi_1'(x)\phi_2(x) = C\ , \tag{3.9}$$

llegamos a una ecuación diferencial lineal de primer orden para la función $\phi_2(x)$. Entonces, si suponemos que conocemos la solución $\phi_1(x)$, podemos calcular la solución[9] $\phi_2(x)$, o viceversa.

De manera constructiva podemos usar el Método de Variación de Constantes (Reducción de orden)

Primer paso: consideremos la ecuación homogénea, i.e. $C = 0$ en (3.9):

$$\frac{\phi_1'}{\phi_1} = \frac{\phi_2'}{\phi_2}$$

$$\Rightarrow (\ln \phi_1)' = (\ln \phi_2)'$$

$$\ln \phi_1 = \ln \phi_2 - A \;\Rightarrow \ln \frac{\phi_2}{\phi_1} = A\,,$$

$$(A \equiv \ln B)\,, \quad \Rightarrow \quad \phi_2 = B\phi_1\,,$$

[9] También, podemos escribir la ecuación (3.7) en la forma $p(x)\left(\phi_1(x)\right)^2 \left(\frac{\phi_2(x)}{\phi_1(x)}\right)' = c$, de donde se obtiene que $\phi_2(x) = \phi_1(x)\int_{x_0}^{x} \frac{dt}{p(t)(\phi_1(t))^2}$.

Segundo paso: suponemos que B no es constante sino que B es una función de x, $B = B(x)$. Entonces substituyendo $\phi_2(x) = B(x)\phi_1(x)$ en (3.9):

$$\phi_1(B\phi_1{}' + B'\phi_1) - \phi_1{}'B\phi_1 = C\,,$$

$$B'\phi_1^2 = C\,,$$

$$B = \int \frac{C}{\phi_1^2} + \alpha\ ,$$

$$\therefore\ \phi_2(x) = \phi_1(x)\int^x \frac{C}{\phi_1^2(x')}dx' + \alpha\phi_1(x)\ .$$

Considerando el problema espectral

$$Lu\ =\ \lambda u\ ,$$

la solución general tiene entonces la forma

$$u = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 = c_1\phi_1 + c_2\phi_1\int^x \frac{dx}{\phi_1^2}\,.$$

Ejemplo, para el caso del oscilador armónico $x \in (-\infty, +\infty)$

$$p(x) = 1\ ,\ q(x) = x^2\ ,$$

para $\lambda = 1\ \Rightarrow u = e^{-x^2/2}$ ¿cuál es la otra solución de S-L?

$\tilde{u}(x) = e^{-x^2/2}\int^x \frac{dy}{e^{-y^2}}$ (es una función parabólica cilíndrica)\,,

en donde el límite inferior es, p.ej. 0, y por lo tanto la integral es divergente cuando $|x| \to \infty$ y $\tilde{u} \sim e^{x^2/2}$, que corresponde a la solución no-normalizable, por tanto, no-física.

3.2 Teorema de Oscilación de Sturm

Operador de Sturm-Liouville

$$Lu = -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}u\right) + q(x)u = \lambda u\,.$$

Propiedades:

1. El Operador de Sturm-Liouville es *Hermitiano*.
2. Sus *eigenvalores* son reales y positivos (discretos).
3. Las *eigenfunciones* son reales y ortogonales para valores propios diferentes.
4. Se pueden *clasificar* las eigenfunciones en la forma que se describe abajo.

La importancia del Teorema de Sturm se aprecia más cuando consideramos lo difícil que es encontrar los valores propios λ_i[10].

Teorema de Oscilación de Sturm

Si ordenamos las soluciones de la ecuación de Sturm-Liouville de forma que los eigenvalores correspondientes crezcan

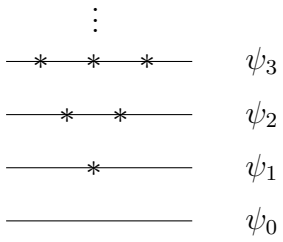
$$\begin{array}{lccccccc} \text{Eigenvalores:} & \lambda_0 < & \lambda_1 < & \lambda_2 < & \ldots & \lambda_n < & \ldots \\ \text{Eigenfunciones:} & \psi_0, & \psi_1, & \psi_2, & \ldots & \psi_n, & \ldots \end{array} \tag{3.10}$$

entonces se puede probar lo siguiente:

1. La eigenfunción ψ_n tiene n ceros simples (nodos) dentro del dominio

[10]Por ejemplo, no es necesario hacer cálculos concretos de los valores propios, es suficiente saber que si una eigenfunción tiene n ceros con valor propio λ_n, entonces deben existir $n-1$ autofunciones con valores propios menores.

2. Los ceros de ψ_n y los de ψ_{n-1} están *intercalados*



3.2.1 Teorema de Comparación de Sturm

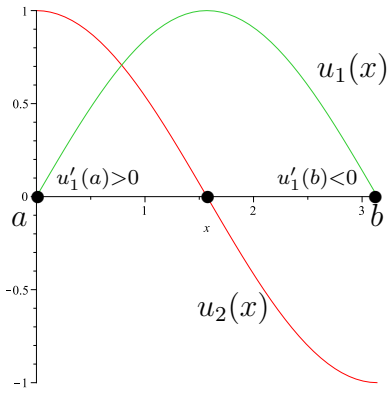


Figura 3.1: Teorema de Oscilación. Si $u_1(x), u_2(x)$ son dos soluciones de la ecuación de eigenvalores de Sturm-Liouville cuyos eigenvalores consecutivos correspondientes son $\lambda_1 < \lambda_2$, entonces, $u_2(x)$ tiene un cero entre dos ceros consecutivos de $u_1(x)$.

Estamos interesados en las soluciones de la ecuación de eigenvalores de Sturm-Liouville (3.1):

$$L\,u = \lambda\,u\,,$$

ó en forma explícita

$$-\left[p(x)\,u'(x)\right]' + q(x)\,u(x) = \lambda\,u(x)\,.$$

Teorema

Sean $u_1(x), u_2(x)$ dos soluciones de la ecuación de eigenvalores de Sturm-Liouville cuyos eigenvalores consecutivos correspondientes son λ_1, λ_2 $(\lambda_1 < \lambda_2)$. Entonces, $u_2(x)$ tiene un cero entre dos ceros consecutivos de $u_1(x)$.

Demostración:
Las ecuaciones de Sturm-Liouville para $u_1(x)$ y $u_2(x)$ son

$$\begin{aligned} -(p(x)\,u_1'(x))' + q(x)u_1(x) &= \lambda_1 u_1(x), \qquad (3.11)\\ -(p(x)\,u_2'(x))' + q(x)u_2(x) &= \lambda_2 u_2(x)\,, \end{aligned}$$

multiplicando la primera ecuación por $u_2(x)$, la segunda ecuación por $u_1(x)$ y restando las ecuaciones se obtiene

$$-u_1(x)(p(x)\,u_2'(x))' + u_2(x)(p(x)\,u_1'(x))' = (\lambda_2 - \lambda_1)u_2(x)\,u_1(x)\,,$$

se demuestra fácilmente que

$$(p(x)W(x))' = (\lambda_2 - \lambda_1)u_2(x)u_1(x)\,. \qquad (3.12)$$

con lo que

$$p(x)W(x) = (\lambda_2 - \lambda_1)\int^x u_1(x')u_2(x')dx'\,.$$

Supongamos que u_2 no desaparece en el intervalo (a, b). Podemos ver que esto es imposible. En efecto, si usamos la definición $W(u_1, u_2) = u_1(x)u_2'(x) - u_1'(x)u_2(x)$, obtenemos que $p(a)W(a) = -p(a)\,u_1'(a)u_2(a) \leq 0$.

Si u_2 *no se anula* en el intervalo (a, b), entonces $u_2 \geq 0$ allí, de modo que

$$p(b)W(b) \geq 0$$

ya que $W(b) = u_1(b)u_2'(b) - u_1'(b)u_2(b) = -u_1'(b)u_2(b) \geq 0$ (véase la Figura). Por otro lado, si $\lambda_2 > \lambda_1$,

$$(\lambda_2 - \lambda_1) \int_a^b u_1 u_2 \, dx > 0 \,,$$

ya que u_1 y u_2 son positivas en (a, b), pero habíamos visto que

$$p(x)W(x) = (\lambda_2 - \lambda_1) \int u_1(x')u_2(x')dx' \,,$$

entonces

$$p(a)W(a) - p(b)W(b) = (\lambda_2 - \lambda_1) \int_a^b u_1(x')u_2(x')dx' > 0 \,,$$

y también vimos que $p(a)W(a) \leq 0$, $p(b)W(b) \geq 0$. El lado izquierdo es ≤ 0. Esto es imposible! Así, de esta manera, se ha demostrado la afirmación por contradicción.

De lo anterior se sigue el siguiente

Teorema de Oscilación de Sturm

El número de eigenvalores de L estrictamente debajo de λ es exactamente el número de ceros de $u(x, \lambda)$ en $(0, \ell)$.

Nota práctica: Es evidente que si la eigenfunción tiene n nodos dentro del dominio, entonces es la eigenfunción del n-ésimo estado excitado, y que existen n eigenvalores por debajo de su eigenvalor.

3.3 Reducción a la forma de Schrödinger

Para transformar el operador de Sturm-Liouville a la forma de Schrödinger, primero consideremos el siguiente operador diferencial de segundo orden mas general:

$$L = -a(x)\frac{d^2}{dx^2} + b(x)\frac{d}{dx} + c(x) \,,$$

si $b(x) = -a'(x)$ obtenemos el operador de *S-L*. En general, el cálculo para transformar el operador diferencial de segundo orden a la forma de Schroedinger tiene dos pasos:

(1) reducir $-a(x)\dfrac{d^2}{dx^2}$ a la forma $-\dfrac{d^2}{dy^2}$,

(2) eliminar los términos que contienen una primera derivada.

Para llevar a cabo el primer paso vamos a buscar un cambio de variable $x = x(y)$. Para realizar el segundo paso es útil introducir el concepto de *Transformación de Norma* (*Gauge Transformation*):

$$e^{\phi} L e^{-\phi} = \hat{L}\,.$$

Entonces, para el paso (1) sea $y = y(x)$ (invertible);

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{dy}\frac{dy}{dx}\ ,$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dy}\right)\cdot\frac{dy}{dx} + \frac{d}{dy}\cdot\frac{d^2y}{dx^2}$$

$$= \frac{d^2}{dy^2}\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + \frac{d^2y}{dx^2}\frac{d}{dy} = (y')^2\,\frac{d^2}{dy^2} + y''\frac{d}{dy}\ .$$

Sustituyendo en nuestro operador diferencial L:

$$L = -a\,(x\,(y))\,(y')^2\,\frac{d^2}{dy^2} - a\,(x\,(y))\ y''\frac{d}{dy} + b\,(x\,(y))\,y'\frac{d}{dy} + c\,(x\,(y))\ ,$$

y demandando que el coeficiente enfrente de la segunda derivada sea uno:

$$(y')^2\,a\,(x\,(y)) = 1 \qquad \Rightarrow$$

$$y'^2 = \frac{1}{a\,(x\,(y))} \quad \Rightarrow \quad y' = \frac{1}{\sqrt{a\,(x\,(y))}};\quad y'' = -\frac{1}{2}\frac{a'}{[a\,(x\,(y))]^{\frac{3}{2}}}$$

$$\Rightarrow \quad y(x) = \int \frac{dx}{a\,(x\,(y))^{\frac{1}{2}}} \quad \therefore$$

$$L = -\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right)\frac{d}{dy} + c\,(x)\ .$$

3.3.1 Transformación de Norma

Ahora vamos a usar la *Transformación de Norma* para eliminar el término con la primera derivada. Pero antes vamos a ver el significado de hacer una transformación de norma: Supongamos que χ es una eigenfunción del operador L:

$$L\chi \;=\; \lambda\chi \;,$$

escribiendo $\chi = e^{-\phi}\widetilde{\chi}$, y sustituyendo en la ecuación de eigenvalores obtenemos

$$L\, e^{-\phi}\widetilde{\chi} = \lambda e^{-\phi}\widetilde{\chi}\,,$$

y multiplicando ambos lados por e^{ϕ} se consigue la ecuación

$$\left(e^{\phi}\, L\, e^{-\,\phi}\right)\widetilde{\chi} = \lambda\,\widetilde{\chi}\,,$$

es decir que las funciones $\widetilde{\chi}$ son eigenfunciones del operador transformado $e^{\phi}\, L\, e^{-\phi}$ con los mismos eigenvalores que los del operador L. Es decir, hemos transformado nuestro problema de eigenvalores original en un problema equivalente transfiriendo parte de la información contenida en el operador a la definición de las eigenfunciones $\widetilde{\chi}$, o, viceversa, en la definición del operador transformado.

Nuestra tarea, ahora, es buscar una función ϕ para transformar el operador L y de tal suerte que la primera derivada en el operador transformado desaparezca. La transformación de la primera derivada es [11]

$$e^{\phi}\frac{d}{dy}\, e^{-\phi} = \frac{d}{dy} - \phi' \;.$$

[11] Recordemos que el operador $e^{\phi}\frac{d}{dy}\, e^{-\phi}$ actúa sobre una función que usualmente no se escribe de manera explícita, i.e.

$$\left\{e^{\phi}\frac{d}{dy}\, e^{-\phi}\right\}\psi(y) = e^{\phi}\Big(e^{-\phi}\frac{d\psi}{dy} - e^{-\phi}\phi'\psi(y)\Big) = \left\{\frac{d}{dy} - \phi'\right\}\psi(y)$$

.

A esta transformación de la derivada

$$\frac{d}{dy} \to \mathcal{D}_y \equiv \frac{d}{dy} - \phi' \ ,$$

se le llama *Transformación de Darboux* [12].

Para cualquier operador diferencial lineal, la transformación covariante de una rotación de norma conduce al reemplazo de la derivada por la derivada covariante en dicho operador diferencial:

$$e^{\phi} L(x,d) e^{-\phi} = L(x,\mathcal{D}) \ .$$

En particular la segunda derivada se transforma como

$$\begin{aligned} e^{\phi} \frac{d^2}{dy^2} e^{-\phi} &= e^{\phi} \frac{d}{d\,y}\, e^{-\phi} e^{\phi} \frac{d}{d\,y} e^{-\phi} = \Big(e^{\phi} \frac{d}{d\,y} e^{-\phi}\Big)^2 \\ &= \Big(\frac{d}{dy} - \phi'\Big)^2 = \Big(\frac{d}{dy} - \phi'\Big)\Big(\frac{d}{dy} - \phi'\Big) \\ &= \frac{d^2}{dy^2} - 2\phi' \frac{d}{dy} - \phi'' + (\phi')^2 \, . \end{aligned}$$

Tarea Considere el operador de Schrödinger del oscilador armónico en una dimensión

$$H_{\text{o.a.}} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \, ,$$

y haga una transformación de norma con $e^{-\phi} = e^{-x^2/2}$ (la función de onda del estado base) para obtener el operador transformado

$$h = e^{\phi} H_{\text{o.a.}} e^{-\phi} \, .$$

Compare el operador resultante con el operador de Hermite.

[12] Al operador $\mathcal{D}_y$ se le llama también *derivada covariante*.

Usando estas relaciones el operador transformado es entonces

$$e^{\phi}Le^{-\phi} = -\left(\frac{d}{dy} - \phi'\right)^2 + \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right)\left(\frac{d}{dy} - \phi'\right) + c\,(x)\ ,$$

$$= -\frac{d^2}{dy^2} + \left(2\phi' + \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right)\right)\frac{d}{dy} + \phi'' - (\phi')^2$$

$$- \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right)\phi' + c\,(x)\ ,$$

Ya que queremos que el término que acompaña a la primera derivada se anule se necesita que:

$$2\phi' + \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right) = 0\,,$$

esta es una ecuación diferencial de primer orden, la cual es fácil de resolver. Recordemos que $\phi' = \dfrac{d\phi}{dy}$, y $a' = \dfrac{d\,a}{dx}$. Podemos escribir esta ecuación como

$$\phi' = -\frac{1}{2\sqrt{a}}\left(\frac{a'}{2} + b\right)$$

Si integramos esta ecuación diferencial obtenemos

$$\phi\,(y) = -\int \frac{1}{2\sqrt{a(x)}}\left(\frac{a'_x\,(x\,(y))}{2} + b\,(x\,(y))\right)dy\,,$$

y

$$\phi'' = \frac{a'_y}{4a^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{a'_x}{2} + b\right) - \frac{1}{2\sqrt{a}}\left(\frac{(a'_x)'_y}{2} + b'_y\right)\ .$$

Con lo anterior obtenemos un operador de Schrödinger.

3.4 Función de Green

Existe un objeto muy importante en la teoría de ecuaciones diferenciales lineales introducida por George Green en 1828 como un método para resolver la ecuación de Poisson en electrostática. A ese objeto se le denomina como la *función de Green*.

El objetivo es encontrar soluciones $u(x)$ a la ecuación diferencial[13]

$$L(x)\,u(x) = f(x)\,, \tag{3.13}$$

en donde $L(x)$ es un operador diferencial lineal y $f(x)$ es un término inhomogéneo. En nuestro caso estaremos interesados en la función de Green del operador de Sturm-Liouville $L_{\text{S-L}}(x)$.

Definición
Sea $L(x)$ un operador diferencial lineal y $G\,(x,y)$ una función tales que se cumple la relación

$$L(x)\,G\,(x,y) = \delta\,(x-y)\ . \tag{3.14}$$

Decimos que $G\,(x,y)$ es la *función de Green* del operador L. El lado derecho $\delta\,(x-y)$ es la función delta de Dirac.

[13]Formalmente la solución a esta ecuación se puede escribir como $u(x) = L^{-1}(x)[f(x)]$ en donde el operador inverso $L^{-1}(x)$ es un operador integral actuando sobre el término inhomogéneo $f(x)$.

3.4.1 Función $\delta(x)$ de Dirac

Definición: Función *Delta* de Dirac [14] $\delta(x)$:

- Propiedades

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0\,, \\ 0 & \text{si } x \neq 0\,, \end{cases} \tag{3.15a}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\, dx = 1\,, \tag{3.15b}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)\, dx = f(a). \tag{3.15c}$$

- Una representación

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} c(\epsilon)\, e^{-\frac{x^2}{\epsilon}}\,.$$

Hay muchas representaciones de la función $\delta(x)$, pero ésta es una de las mas importantes para realizar cálculos concretos.

Otra representación muy usada es mediante una función Lorentziana $\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{\epsilon}{\pi(x^2+\epsilon^2)}$, y otras como $\frac{1}{2\epsilon} e^{-|x|/\epsilon}$, $\frac{\operatorname{sech}^2(x/\epsilon)}{2\epsilon}$, $\frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi\, x}$.

[14] Paul Adrien Maurice Dirac, (8 de agosto de 1902 - 20 de octubre de 1984) fue un físico teórico británico que contribuyó de forma fundamental al desarrollo de la mecánica cuántica y la electrodinámica cuántica. Paul Dirac compartió en 1933 el Premio Nobel de Física con Erwin Schrödinger "por el descubrimiento de nuevas teorías atómicas productivas". Se dice que cuando cumplió 62 años la Universidad de Cambridge solicito un permiso especial al Rey para que Dirac siguiera trabajando en la Universidad. El rey negó el permiso. Pasó los últimos diez años de su vida en la Universidad Estatal de Florida en los Estados Unidos.

Tarea Encuentre el valor explícito de la constante $c(\epsilon)$. ¿Cuál es la dimensión de δ? ¿cuál es la dimensión de ϵ?

$$[\delta] = \left[\frac{1}{x}\right], \quad [\epsilon] = [x^2],$$
$$\Rightarrow c(\epsilon) \sim \epsilon^{-1/2}.$$

- Representación de Fourier[15]

  La transformación de Fourier de la función delta es

  $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\, \mathrm{e}^{i\,x\,y}\, dx \; = 1\,.$$

  La representación de Fourier de la función $\delta(x)$ es

  $$\delta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-i\,x\,y}\, dy\,.$$

Siempre es posible agregar a la función de Green cualquier solución $G_0(x, y)$ de la ecuación *homogénea*

$$L(x)\, G_0\,(x, y) = 0\,,$$

entonces $\widetilde{G}\,(x, y) = G\,(x, y) + G_0\,(x, y)$ también será solución de la ecuación (3.14).

La función $\delta(x - y)$ es invariante ante traslaciones pues sólo depende de la diferencia $x - y$.

[15]Por definición la transformada de Fourier de una función $f(x)$ se define como $\tilde{f}(y) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{i\,x\,y}\, dx$. La representación de Fourier de la función $f(x)$ es $f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(y)\, \mathrm{e}^{-i\,x\,y}\, dy$.

Un ejemplo: *Ecuación de Poisson* (Electrostática)

$$\nabla^2\Phi(x) = \rho\,(x)\ , \qquad x \in \mathbb{R}^3\,,$$

describe el potencial electrostático $\Phi(x)$ producido por una densidad de carga $\rho(x)$. La función de Green $G(x,y) \equiv \phi(x,y)$ satisface la ecuación

$$\nabla^2\phi(x,y) = \delta\,(x-y)\ ,$$

$$x, y \in \mathbb{R}^3\,,$$

aquí ϕ (la función de Green del operador Laplaciano ∇^2) es la solución de la ecuación de Poisson correspondiente a una *carga puntual* situada en $x = y$. Para elegir G_0, necesitamos aludir a las condiciones de frontera físicas. Esto es suficiente para determinar completamente la función de Green en el problema de Poisson.

> Del curso de Electromagnetismo sabemos que para el caso de una carga puntual [16] situada en el punto $x = y$, el potencial correspondiente,
>
> $$\phi(x,y) \ = \ \frac{1}{|x-y|}\ ,$$
>
> es la función de Green del operador ∇^2 o, en otras palabras, $\phi(x,y)$ es el potencial Coulombiano o Newtoniano en el espacio de dimensión tres.

¿Por qué es útil introducir la función de Green?

Supongamos que tenemos una ecuación diferencial lineal escrita en la forma

$$L(x)u(x) = f(x)\,. \tag{3.16}$$

[16] La función de Green corresponde al potencial de Coulomb producido por una carga puntual unitaria situada en el punto $x = y$.

Entonces, si conocemos la función de Green $G(x, y)$ del operador L, podemos obtener la solución $u(x)$ de la ecuación como[17]

$$u(x) = \int G(x, y) f(y) \, dy \, . \tag{3.17}$$

En efecto, partiendo de la ecuación

$$L(x) G(x, y) = \delta(x - y) \ ,$$

multiplicamos ambos lados por la función $f(y)$ e integramos respecto de la variable y, se obtiene (dado que el operador $L(x)$ es lineal)

$$\begin{aligned} L(x) \int G(x, y) f(y) \, dy &= \int \delta(x - y) \ f(y) \, dy \, , \\ &= f(x) \, . \end{aligned}$$

Comparando con la ecuación diferencial (3.16) obtenemos inmediatamente la solución para $u(x)$ en la forma (3.17).

Forma integral del problema espectral

¿Qué pasa en el caso del problema espectral $Lu = \lambda u$? En este caso la solución

$$u(x) = \lambda \int G(x, y) \, u(y) \, dy \, .$$

corresponde a la *Forma Integral* del problema. El *kernel* $G(x, y)$ es conocido y la función $u(x)$ es la incógnita.

El problema es: cómo construir $G(x, y)$? Tenemos tres condiciones que se deben cumplir:

[17] Aqui podemos ver el significado de la ecuación formal (véase el pie de página 13) $u(x) = L^{-1}(x)[f(x)] \equiv \int G(x, y) f(y) \, dy$.

(i) $G(x, y)$ debe tener un comportamiento contínuo[18]

(ii) lejos de $x = y$ la función $G(x, y)$ debe obedecer la ecuación homogénea $LG(x, y) = 0$, y las condiciones de frontera que satisface la solución $u(x)$ en los bordes del intervalo.

(iii) Si integramos la ecuación (3.14) alrededor de $x = y$ (para un operador de segundo orden), se observa que la primera derivada $G'(x, y)$ tiene una discontinuidad en $x = y$.

3.4.2 Función de Green de Sturm-Liouville

El operador de Sturm-Liouville es uno de los pocos operadores para los cuales se conoce la forma de la función de Green. No sabemos cómo encontrar la función de Green de manera directa. Entonces lo hacemos de forma indirecta. Por ejemplo, si resolvemos $L\,\phi(x) = f(x)$ para algún caso particular y luego comparamos con $\phi(x) = \int G(x, y)\, f(y)\, dy$ podemos tratar de adivinar la forma de $G(x, y)$.

[18]Para una ecuación diferencial de segundo orden, la función de Green correspondiente satisface la ecuación $a(x)G''(x, y)+b(x)G'(x, y)+c(x)G(x, y) = \delta(x-y)$. Si integramos en un pequeño intervalo alrededor de $x = y$, *i.e.*

$$\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} \left[a(x)\frac{d^2}{dx^2}G(x, y) + b(x)\frac{d}{dx}G(x, y) + c(x)G(x, y) \right]$$

$$= \int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} \delta(x - y) = 1,$$

y suponemos que $G(x, y)$ es contínua en $x = y$, entonces desaparece la contribución de los dos últimos términos dentro de la expresión entre paréntesis, y se ve que la primera derivada de $G(x, y)$ es discontínua:

$$\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} a(x)\frac{d}{dx}G'(x, y) = 1\,.$$

Estamos interesados en resolver una ecuación diferencial lineal de segundo orden de la forma

$$a(x)\,\phi''(x) + b(x)\,\phi'(x) + c(x)\,\phi(x) = f(x)\,,$$

en donde $a(x), b(x), c(x)$ son funciones contínuas.

Primero tratamos la solución de la ecuación homogénea.

$$a(x)\,\phi''(x) + b(x)\,\phi'(x) + c(x)\,\phi(x) = 0\,.$$

Sabemos que existe un sistema fundamental de soluciones $\{v_1(x), v_2(x)\}$ y que podemos escribir la solución general de la ecuación homogénea como una superposición lineal

$$\phi(x) = c_1\,v_1(x) + c_2\,v_2(x) \qquad c_1, c_2 \;=\; \text{constantes.}$$

Ahora, para resolver la ecuación inhomogénea podemos usar el método de variación de constantes y considerar que c_1, c_2 son funciones de la variable x para proponer el siguiente Ansatz

$$\phi(x) = c_1(x)\,v_1(x) + c_2(x)\,v_2(x)\,,$$

como solución del problema inhomogéneo

$$L\,\phi(x) = f(x)\,.$$

Aqui vamos a limitarnos al caso de la ecuación de Sturm-Liouvile (3.1) que escribimos como

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}u(x)\right) + q(x)u(x) = f(x)\,, \tag{3.18}$$

y supongamos que conocemos las dos soluciones de la ecuación homogénea $\{v_1(x), v_2(x)\}$. Entonces, proponemos que la solución de la ecuación inhomogénea tiene la forma

$$u(x) = c_1(x)v_1(x) + c_2(x)v_2(x)\,. \tag{3.19}$$

Calculamos la primera derivada, y agrupamos convenientemente

$$u'(x) = c_1(x)v_1'(x) + c_2(x)v_2'(x) + (c_1'(x)v_1(x) + c_2'(x)v_2(x)) \,, \tag{3.20}$$

y luego la segunda derivada

$$\begin{aligned} u''(x) = {} & c_1(x)v_1''(x) + c_2(x)v_2''(x) + c_1'(x)v_1'(x) + c_2'(x)v_2'(x) \\ & + c_1'(x)v_1'(x) + c_2'(x)v_2'(x) + c_1''(x)v_1(x) + c_2''(x)v_2(x) \,, \end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación de Sturm-Liouville (3.18)

$$-p(x)u''(x) - p'(x)u'(x) + q(x)u(x) = f(x) \,,$$

y organizando apropiadamente:

$$\begin{aligned} & c_1(x)\left(-p(x)v_1''(x) - p'(x)v_1'(x) + q(x)v_1(x)\right) + \\ & \quad c_2(x)\left(-p(x)v_2''(x) - p'(x)v_2'(x) + q(x)v_2(x)\right) + \\ & \qquad - 2p(x)\left(c_1'(x)v_1'(x) + c_2'(x)v_2'(x)\right) \\ & \qquad - p'(x)\left(c_1'(x)v_1(x) + c_2'(x)v_2(x)\right) \\ & \qquad - p(x)\left(c_1''(x)v_1(x) + c_2''(x)v_2(x)\right) = f(x) \,, \end{aligned}$$

en donde los dos primeros términos desaparecen ya que v_1, v_2 satisfacen la ecuación homogénea. La solución se reduce a encontrar la solución del sistema de ecuaciones para $c_1'(x), c_2'(x)$:

$$\begin{aligned} c_1'(x)v_1(x) + c_2'(x)v_2(x) &= 0 \,, \\ c_1'(x)v_1'(x) + c_2'(x)v_2'(x) &= \frac{f(x)}{p(x)} \,. \end{aligned} \tag{3.21}$$

La solución se encuentra fácilmente:

$$c_1'(x) = -\frac{f(x)v_2(x)}{p(x)\left[v_1(x)v_2'(x) - v_1'(x)v_2(x)\right]} \,, \tag{3.22}$$

$$c_2'(x) = -\frac{f(x)v_1(x)}{p(x)\left[v_1(x)v_2'(x) - v_1'(x)v_2(x)\right]} \,. \tag{3.23}$$

Sustituyendo en el Ansatz obtenemos

$$\phi(x) = \frac{-1}{p(0)W(0)} \left[v_2(x) \int_0^x f(y)\, v_1(y)\, dy + v_1(x) \int_x^\ell f(y)\, v_2(y)\, dy \right] ,$$

con lo cual podemos obtener la forma de la función de Green

$$G(x,y) = \frac{1}{p(0)W(0)} \begin{cases} v_1(x)\, v_2(y), & 0 \le x \le y\,, \\ \\ v_1(y)\, v_2(x), & y \le x \le \ell\,. \end{cases}$$

en donde $W(x)$ es el Wronskiano de v_1, v_2.

La función de Green de Sturm-Liouville tiene dos propiedades importantes

- Simetricidad: $G_{SL}(x,y) = G_{SL}(y,x)$
- Discontinuidad de su derivada:

$$\frac{\partial G_{SL}(x,y)}{\partial x}\Big|_{x\to y+0} - \frac{\partial G_{SL}(x,y)}{\partial x}\Big|_{x\to y-0} = -\frac{1}{p(y)} \quad .$$

3.5 Representación Matricial

En esta sección vamos a ver cómo transformar el problema espectral de Sturm Liouvile (3.1) a un problema algebraico de diagonalización matricial.
Seleccionamos una base de funciones $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n, \ldots$ en el *espacio de Hilbert*, en donde las funciones ϕ_n cumplen:

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{i,j}\,,$$

es decir que el conjunto $\{\phi_i\}$ es ortonormal respecto del producto escalar $(\,\cdot\,,\cdot\,)$. Se obtiene la representación matricial del operador $\hat{L}$ de Sturm-Liouville definiendo los elementos de matriz del operador $\hat{L}$ como

$$h_{i,j} \equiv \left(\phi_i, \hat{L}\phi_j\right) ,$$

que definen una matriz de dimensión infinita de la forma:

$$L = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} & \dots \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \dots \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} . \tag{3.24}$$

En esta representación, el problema espectral $Lu = \lambda\, u$ se *reduce* a la solución de un sistema de valores propios de la matriz L de dimensión infinita! En la práctica, tenemos que aproximar el problema por un problema de dimensión finita (véase la sección 3.6 más adelante).

Debido a la hermiticidad del operador L, la matriz correspondiente (3.24) es una matriz simétrica:

$$h_{j,i} \equiv \left(\phi_j, \hat{L}\phi_i\right) = \left(\hat{L}\phi_j, \phi_i\right) = h_{i,j}\,.$$

En general para resolver el problema espectral

$$\hat{H}\psi \;=\; E\psi\,, \tag{3.25}$$

expresamos la función de onda ψ (eigenfunción) como una expansión en una base ortonormal del espacio de Hilbert $\{\phi_k,\ {}_{k=0\ldots\infty}\}$:

$$\psi = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \phi_k\,. \tag{3.26}$$

Sustituyendo esta expansión en (3.25) se obtiene (usando la propiedad de linearidad del operador H):

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \hat{H}\phi_k = E \sum_{k=0}^{\infty} a_k \phi_k\,.$$

Ahora, si multiplicamos escalarmente por ϕ_m encontramos:[19]

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k(\phi_m, \hat{H}\phi_k) = E\sum_{k=0}^{\infty} a_k(\phi_m, \phi_k) = Ea_m\,,$$

que tiene la forma matricial[20]

$$H_{mk}\, a_k = E\, a_m\,, \tag{3.27}$$

en donde los coeficientes a_k (a_m), $k, m = 0 \ldots \infty$ son las componentes de los vectores propios correspondientes de la matriz H cuyos elementos de matriz son $H_{mk} \equiv (\phi_m, \hat{H}\phi_k)$.

Podemos hacer una aproximación a la solución del problema de dimensión infinita si *cortamos* la base $\{\phi_k, k = 1, 2, \ldots N\}$ (nótese que ahora empezamos con el índice $k = 1$). En este caso obtenemos un problema común de eigenvalores de una matriz de dimensión finita $N \times N$:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \ldots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & \ldots & H_{2N} \\ & & \cdots & \\ H_{N1} & H_{N2} & \ldots & H_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}.$$

La diagonalización de la matriz $H_{N\times N}$ nos dará N eigenvalores $E_i, i = 1, \ldots N$ y sus correspondientes eigenvectores.

Deben existir algunas bases en donde la representación matricial es más simple:

[19] Usando la propiedad de linearidad del producto escalar $(u, \alpha v + \beta w) = \alpha(u, v) + \beta(u, w)$.

[20] Usando la notación de suma implícita para índices repetidos de Einstein.

1. Si $L\phi_i = \lambda_i \phi_i$, es decir, si las ϕ_i son eigenfunciones de L, entonces:

$$h_{i,j} = (\phi_i, L\phi_j) = \lambda_j \, (\phi_i, \phi_j) = \lambda_j \delta_{i,j} \, ,$$

   $L = \operatorname{diag} \lambda$ es una matriz diagonal con los eigenvalores en la diagonal.

2. Forma de Jacobi (matriz tridiagonal)

   Una matriz cuadrada $J = (a_{i,k})$ con entradas reales tal que $a_{i,k} = 0$ para $|i - k| > 1$.

   Si uno escribe $a_{i,i} = a_i \, , (i = 1, \ldots n)$, $a_{i,i+1} = b_i$ y $a_{i+1,i} = c_i$, entonces una matriz de Jacobi tiene la forma

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & & \ldots & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & \ldots & 0 & 0 \\ & & & & & & \\ . & . & . & . & \ldots & . & . \\ & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & & \ldots & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$$

3.5.1 Procedimiento de Lanczos

El matemático húngaro Lanczos inventó un procedimiento muy interesante para obtener una representación matricial de un operador hermitiano en forma tridiagonal:

Procedimiento de Lanczos

- Sea ϕ_0 una función inicial normalizada elegida adecuadamente que satisfaga las condiciones de frontera del problema de Sturm-Liouville. Normalmente ϕ_0 se elige de forma que sea una función sin nodos que represente en algún sentido al estado base.

- Se construye la función ϕ_1 ortonormal respecto de ϕ_0 a partir de la función obtenida al aplicar el operador L a la función ϕ_0, i.e. a partir de la función $L\phi_0$. Usando el procedimiento de Gram-Schmidt se obtiene que la función ϕ_1 es de la forma:

$$\phi_1 = \frac{L\phi_0 - (L\phi_0, \phi_0)\phi_0}{||L\phi_0 - (L\phi_0, \phi_0)\phi_0||}\,,$$

$$(\phi_1, \phi_0) = 0\,,$$

$$(\phi_1, \phi_1) = 1\,.$$

- Se construye la función ϕ_2 ortonormal respecto de ϕ_0, ϕ_1 a partir de la función obtenida al aplicar el operador L a la función ϕ_1, i.e. a partir de la función $L\phi_1$:

$$\phi_2 = \frac{L\phi_1 - (L\phi_1, \phi_1)\phi_1 - (L\phi_1, \phi_0)\phi_0}{||L\phi_1 - (L\phi_1, \phi_1)\phi_1 - (L\phi_1, \phi_0)\phi_0||}\,,$$

$$(\phi_2, \phi_{1,0}) = 0\,,$$

$$(\phi_2, \phi_2) = 1\,.$$

- La función n-ésima ϕ_n, tal que $(\phi_n, \phi_k) = \delta_{n,k}$, se construye como

$$\phi_n = \frac{L\phi_{n-1} - C_{n-1}\phi_{n-1} - C_{n-2}\phi_{n-2} - \ldots C_0\phi_0}{||L\phi_{n-1} - C_{n-1}\phi_{n-1} - C_{n-2}\phi_{n-2} - \ldots C_0\phi_0||}\,, \tag{3.28}$$

con

$$\begin{aligned} C_{n-1} &= (L\phi_{n-1}, \phi_{n-1})\,, \\ C_{n-2} &= (L\phi_{n-1}, \phi_{n-2})\,, \\ &\ldots \\ C_0 &= (L\phi_{n-1}, \phi_0)\,. \end{aligned}$$

Se demuestra fácilmente que la representación matricial del operador L es tridiagonal en esta *base*[21].

Demostración:

Para ver que la representación matricial del operador L es tridiagonal lo que tenemos que demostrar es que $L\phi_n$ sólo depende de los términos ϕ_{n+1}, ϕ_n, y ϕ_{n-1}, y por lo tanto $L_{m,n} \equiv (\phi_m, L\phi_n) \neq 0$ solo si $m = n+1, n, n-1$.

De la fórmula (3.28) para la $(n+1)$-ésima función de Lanczos ϕ_{n+1} (no-normalizada) se obtiene:

$$L\phi_n = \phi_{n+1} + (L\phi_n, \phi_n)\phi_n + (L\phi_n, \phi_{n-1})\phi_{n-1} \quad (3.29)$$
$$+ \ (L\phi_n, \phi_{n-2})\phi_{n-2} \ldots + (L\phi_n, \phi_0)\phi_0 \, .$$

Ahora, usando la propiedad de hermiticidad del operador L podemos probar que el primer término en la segunda línea de la relación anterior desaparece:

$$(L\phi_n, \phi_{n-2}) = (\phi_n, L\phi_{n-2}) = 0 \, ,$$

ya que, por construcción, $L\phi_{n-2}$ "depende" (compare con (3.29)) a lo más de $\phi_{n-1} \ldots \phi_0$, y $(\phi_n, \phi_k) = 0$, para $k = 0 \ldots n-1$. Se aplica el mismo argumento para el resto de los términos en la segunda línea de la ecuación (3.29)

$$(L\phi_n, \phi_{n-3}) = (L\phi_n, \phi_{n-4}) \ldots = (L\phi_n, \phi_0) = 0 \, ,$$

y por lo tanto

$$L\phi_n = \phi_{n+1} + (L\phi_n, \phi_n)\phi_n + (L\phi_n, \phi_{n-1})\phi_{n-1} \, .$$

$$\Rightarrow$$

[21] En realidad no se sabe *a priori* si la secuencia de funciones construida con el procedimiento de Lanczos va a formar una base completa. De hecho es fácil encontrar ejemplos en donde la secuencia de funciones de Lanczos *no es* una base completa.

$$(\phi_i, L\phi_j) = \begin{cases} 0 & |i-j| > 1\,, \\ \neq 0 & i = j\,, \\ \neq 0 & i = j \pm 1\,. \end{cases}$$

3.5.2 Otra demostración

El procedimiento de Lanczos puede plantearse de varias formas. Por ejemplo, consideremos las funciones de Lanczos ortogonales no-normalizadas generadas por un operador hermitiano (hamiltoniano) $\hat{H}$ y la función inicial ϕ_0 definidas como

$$\phi_n = \hat{H}\phi_{n-1} - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \hat{H}\phi_{n-1}, \phi_k \rangle \, \phi_k\,, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{3.30}$$

Con esta definición es fácil demostrar que

$$\hat{H}\phi_n = c_{n+1}\phi_{n+1} + c_n\phi_n + c_{n-1}\phi_{n-1}\,, \tag{3.31}$$

en donde

$$c_{n+1} = 1, c_n = \langle \hat{H}\phi_n, \phi_n \rangle, c_{n-1} = \langle \hat{H}\phi_n, \phi_{n-1} \rangle\,,$$

y por lo tanto la representación matricial de $\hat{H}$ en la base $\{\phi_i\}$ será tridiagonal. En efecto, si observamos la secuencia de las primeras funciones de Lanczos de acuerdo con (3.30) obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \phi_0\,, \\ \phi_1 &= \hat{H}\phi_0 - \langle \hat{H}\phi_0, \phi_0 \rangle \, \phi_0\,, \\ \phi_2 &= \hat{H}\phi_1 - \langle \hat{H}\phi_1, \phi_1 \rangle \, \phi_1 - \langle \hat{H}\phi_1, \phi_0 \rangle \, \phi_0\,, \\ \phi_3 &= \hat{H}\phi_2 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_2 \rangle \, \phi_2 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_1 \rangle \, \phi_1 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_0 \rangle \, \phi_0\,. \end{aligned} \tag{3.32}$$

Ahora bien, usando la propiedad de hermiticidad de $\hat{H}$ en la forma de la función ϕ_3 para escribir

$$\langle \hat{H}\phi_2, \phi_0 \rangle = \langle \phi_2, \hat{H}\phi_0 \rangle = 0\,,$$

ya que $\hat{H}\phi_0$ sólo tiene proyección sobre el *subespacio* generado por $\{\phi_0, \phi_1\}$, como se ve de la definición de la función ϕ_1 arriba. Por lo tanto las primeras funciones (3.32) satisfacen la propiedad (3.31). La demostración general puede hacerse por inducción: consideremos la función ϕ_{n+1}

$$\begin{aligned}\phi_{n+1} &\equiv \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^{n} \langle \hat{H}\phi_n, \phi_k \rangle \, \phi_k \,, \\ &= \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^{n} \langle \phi_n, \hat{H}\phi_k \rangle \, \phi_k \,, \end{aligned} \tag{3.33}$$

en donde hemos usado la propiedad de hermiticidad del operador $\hat{H}$. Ahora bien, por hipótesis

$$\hat{H}\phi_k = c_{k+1}\phi_{k+1} + c_k\phi_k + c_{k-1}\phi_{k-1} \,, \quad (k < n) \,. \tag{3.34}$$

en donde $c_{k+1} = 1, c_k = \langle \hat{H}\phi_k, \phi_k \rangle, c_{k-1} = \langle \hat{H}\phi_k, \phi_{k-1} \rangle$. Sustituyendo (3.34) en (3.33) obtenemos

$$\begin{aligned}\phi_{n+1} = \hat{H}\phi_n &- \sum_{k=0}^{n} \langle \phi_n, \ \phi_{k+1} + c_k\phi_k + c_{k-1}\phi_{k-1} \rangle \, \phi_k \,, \\ =\hat{H}\phi_n &- \sum_{k=0}^{n} \Big(\langle \phi_n, \phi_{k+1} \rangle \ + c_k \langle \phi_n, \phi_k \rangle \ + c_{k-1} \langle \phi_n, \phi_{k-1} \rangle \Big) \phi_k \\ =\hat{H}\phi_n &- \ \langle \phi_n, \phi_n \rangle \, \phi_{n-1} - c_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle \, \phi_n \,, \end{aligned}$$

en donde el último término no contribuye ya que $k \leq n$. Por lo tanto $\hat{H}\phi_n$ satisface la propiedad (3.31), i.e.

$$\hat{H}\phi_n = \phi_{n+1} + c_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle \, \phi_n + \langle \phi_n, \phi_n \rangle \, \phi_{n-1} \,.$$

3.6 Diagonalización del Hamiltoniano

Sea $H = -\partial_x^2 + V(x)$, un Hamiltoniano, y $\{\phi_i\}_{i=0}^{\infty}$ una *base*. La representación Matricial del Hamiltoniano en esta base

esta dada por una matriz de dimensión infinita de la forma:

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & . & . & . & h_{1j} & . & . & . \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & . & . & . & h_{2j} & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ h_{i1} & h_{i2} & h_{i3} & . & . & . & h_{ij} & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . & . \end{pmatrix},$$

en donde los *elementos de matriz* h_{ij} están dados por

$$h_{i,j} = \frac{(\phi_i|H|\phi_j)}{\sqrt{(\phi_i|\phi_i)\,(\phi_j|\phi_j)}}\,.$$

Visto de esta manera, el problema de eigenvalores de Schrödinger se reduce a la diagonalización de la matriz H (es decir, encontrar un cambio de base en donde H tenga una forma diagonal). En este caso tenemos que resolver la *ecuación secular*, ó *ecuación característica*:

$$\det \|H - E\| = 0\,,$$

que es en general una ecuación *trascendental*[22] con un número infinito de soluciones. Esto es en realidad el origen de las dificultades con este método.

Una forma de aproximar el problema de eigenvalores es considerar *cortes finitos* en la matriz Hamiltoniana, por ejemplo un corte de tamaño $k \times k$:

$$H = \left(\begin{array}{ccccc|c} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1k} & \dots \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2k} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 \\ h_{k1} & h_{k2} & h_{k3} & \dots & h_{kk} & \\ - & - & - & - & - & \\ & & 0 & & & 0 \\ & & \dots & & & \dots \end{array}\right)$$

[22] Piense por ejemplo en una ecuación del tipo $\tan x - x = 0$.

lo que equivale a suponer que fuera del bloque, los elementos de matriz son cero. Esto es en realidad sólo una aproximación. En esta aproximación la ecuación característica

$$\det \left\| H - \tilde{E} \right\|_{k\times k} \;=\; 0 \;\Rightarrow$$

$$P_k\left(\tilde{E}\right) \;=\; 0\;,$$

resulta ser un polinomio característico $P_k\left(\tilde{E}\right)$ de grado k cuyas raíces $\tilde{E}_0, \tilde{E}_1, \tilde{E}_2 \ldots$ corresponderán a una aproximación a los eigenvalores verdaderos del problema $E_0, E_1, E_2 \ldots$. Para ver si esta aproximación tiene sentido tenemos que checar el límite[23]

$$\lim_{k\to\infty} \det \left\| H - \tilde{E} \right\|_{k\times k} \stackrel{?}{=} \det \|H - E\| \;.$$

o, equivalentemente que $\lim_{k\to\infty} \tilde{E}_j(k) = E_j\,, \quad j = 0 \ldots k\,.$

¿Qué significa entonces la aproximación anterior?

Significa, como ya se dijo, que suponemos que el resto de los elementos de la matriz en el Hamiltoniano que se encuentra fuera del bloque $k \times k$, son cero! El peligro reside precisamente en que en muchos casos estos elementos de matriz no son cero y que pueden dar contribuciones importantes!

3.6.1 Ejemplos

- $k = 1, \qquad E_0 = h_{11} \qquad$ (bloque de 1×1).

[23] En el límite $k \to \infty$ se espera recuperar la representación en serie de potencias de una ecuación trascendental con un número infinito de ceros.

- para un bloque de tamaño k, tenemos $P_k(E) = 0$ y suponemos que tiene k raíces reales (H es Hermitiano) que podemos ordenar en orden creciente: $E_0 < E_1 < E_2 < ... < E_k$.

Primer caso no trivial.
$k = 2$

$$\det \begin{Vmatrix} h_{11} - E & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} - E \end{Vmatrix} = 0 \qquad \Rightarrow$$

$$E^2 - (h_{11} + h_{22})\, E + \left(h_{11}h_{22} - h_{12}^2\right) = 0 \; . \tag{3.35}$$

- Obsérvese que $(h_{11} + h_{22}) = Tr\, H$, $(h_{11}h_{22} - h_{12}^2) = Tr\, H^2$.
- La ecuación (3.35) tiene dos raíces, las cuales son:

$$E_{12} = \frac{h_{11} + h_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(h_{11} + h_{22})^2}{4} + h_{12}^2 - h_{11}h_{22}} \; .$$

El eigenvalor asociado al signo '$-$'corresponde al *estado base* .

3.6.2 Teorema Cayley-Hamilton y alrededor

Consideremos el polinomio característico para una matriz H de dimensión $n \times n$, escrito convenientemente como:

$$P_n(E) \;=\; E^n - c_1 E^{n-1} + c_2 E^{n-2} + \ldots + (-)^i c_i E^{n-i} + \ldots + (-)^{n-1} c_{n-1} E + (-)^n c_n \; . \tag{3.36}$$

El teorema fundamental del algebra establece que todo polinomio de grado mayor que cero tiene al menos una raíz. Esto

implica que todo polinomio de grado n tiene exactamente n raíces complejas, y significa que se puede factorizar y ser escrito como producto de monomios en la forma

$$P_n\,(E) \;=\; (E-\epsilon_1)(E-\epsilon_2)(E-\epsilon_3)\ldots(E-\epsilon_n)\,,$$

en donde $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots$ son las raíces de $P_n(E)$. Las fórmulas de Vieta relacionan los coeficientes del polinomio (3.36) con los polinomios elementales simétricos de los ceros ϵ_j de $P_n\,(E)$:

$$\begin{aligned}
c_1 &= \epsilon_1+\epsilon_2+\ldots+\epsilon_n \;=\sum_{j=1}^{n}\epsilon_j\;,\\
c_2 &= \epsilon_1\epsilon_2+\ldots+\epsilon_{n-1}\epsilon_n \;=\sum_{1\le j<\ell}^{n}\epsilon_j\epsilon_\ell\;,\\
c_3 &= \epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3+\ldots+\epsilon_{n-2}\epsilon_{n-1}\epsilon_n \;=\sum_{1\le j<\ell<m}^{n}\epsilon_j\epsilon_\ell\epsilon_m\;,\\
&\ldots\\
c_n &= \epsilon_1\epsilon_2\ldots\epsilon_{n-1}\epsilon_n\;.
\end{aligned}$$

Dichos ceros $\epsilon_j, j = 1, 2, \ldots n$ son por supuesto los valores propios de H y las relaciones anteriores pueden ser de gran utilidad cuando buscamos los eigenvalores de la matriz H.

Teorema de Cayley-Hamilton

El Polinomio Característico de la matriz H, con la matriz H como su argumento, es idénticamente cero

$$P_n\,(H) \;=\; H^n - c_1\,H^{n-1} + c_2\,H^{n-2} + \ldots + (-)^i\,c_i\,H^{n-i} + \ldots + (-)^{n-1}\,c_{n-1}\,H + (-)^n\,c_n = 0\;.$$

Ahora definimos las siguientes trazas

$$\mathrm{Tr}H^p = \sum_{i=1}^{n}\epsilon_i^p \equiv t_p(\epsilon)\;, \qquad p=1,2,3,... \tag{3.37}$$

para la matriz H y sus potencias. Usamos la propiedad de invariancia de las trazas para escribirlas en términos de los eigenvalores de H. En general depende de n^2 parámetros complejos (reales). Los objetos $t_p(\epsilon)$ son polinomios de Newton de los eigenvalores $\epsilon_i,\ i{=}1,2,{\ldots}n$.

$$\begin{aligned} t_1(\epsilon) &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + \ldots \epsilon_n \,, \\ t_2(\epsilon) &= \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \ldots \epsilon_n^2 \,, \\ t_3(\epsilon) &= \epsilon_1^3 + \epsilon_2^3 + \ldots \epsilon_n^3 \,, \\ &\ldots \end{aligned}$$

Se tienen dos propiedades:

- Para un número de variables k fijo $(\epsilon_1, \epsilon_2 \ldots \epsilon_k)$, los polinomios elementales simétricos $c_i,\ i = 1, \ldots k$ de dichas variables, están relacionados con los polinomios de Newton "vía los polinomios de Bell".
  Los polinomios symmetricos $c_{k+p} = 0$ para $p > 0$ (no existen).

- A partir del grado k, los polinomios de Newton son "algebraicamente dependientes"

$$t_p(\epsilon) = Pol_{p-k}(t_1(\epsilon), t_2(\epsilon), \ldots, t_k(\epsilon)) \ ,\ p > k \ , \quad (3.38)$$

  donde los polinomios Pol_{p-k} son conocidos.

De estas dos propiedades de los polinomios elementales simétricos y de los polinomios de Newton podemos saber que habrá una dependencia entre las Trazas. En particular, en el caso (3.38) el Teorema dice que:

$$\underset{p>k}{t_p} = Pol_{p-k}\underbrace{(t_1, t_2, ..., t_k)}_{k \text{ Trazas } l.i.}$$

Esto también permite escribir los coeficientes c_i en el polinomio característico (3.36) en términos de las Trazas (3.37) $c_i = c_i(T)$, $(T = \{\mathrm{Tr}H, \mathrm{Tr}H^2, \ldots\})$ para llegar finalmente a

$$P_k(E) = E^k - c_1(T)E^{k-1} + c_2(T)E^{k-2} + \ldots + (-)^i\, c_i(T)E^{k-i} + \\ \ldots + (-)^{k-1}c_{k-1}(T)E + (-)^k c_k(T)\,, \qquad (3.39)$$

en donde

$$c_1(T) = \mathrm{Tr}H\ , \\ c_2(T) = (\mathrm{Tr}H)^2 - \mathrm{Tr}H^2, \\ \ldots \text{ etc.}$$

La fórmula (3.39) nos permite construir fácilmente la ecuación característica.

Tarea Para una Matriz 2×2, calcular t_1, t_2, t_3. Demostrar que

$$t_3 = \alpha t_1^3 + \beta t_1 t_2\,.$$

Encuentre los coeficientes α, β. Conjetura: los coeficientes α, β son universales, independientes de la matriz particular.

LECCIÓN 4

Funciones analíticas (repaso)

Dios creó los números naturales; lo demás es obra del hombre.
L. Kronecker (1823-1891)

4.1 Funciones analíticas

Empecemos por un poco de Historia (consideración de Kronecker). Hace algunos miles de años:

$$\begin{array}{ccc} \text{números naturales} & \to & \text{números racionales} \\ n & & \frac{n}{m} \end{array}$$

$$\to \quad n \overset{\sqrt{n^2+m^2}}{\underset{m}{\triangle}}$$

números irracionales

Podemos decir que para entender la existencia de los números irracionales tuvimos que *salir* de la línea recta.

Vamos cuál es la analogía en el caso de funciones:

$$\begin{array}{ccc} \text{funciones de una variable real} & \rightarrow & \text{funciones + trayectorias} \\ \text{(línea)} & & \text{(plano)} \\ & & \text{Cada punto dos números:} \\ & & \Rightarrow \text{números complejos} \end{array}$$

Para una función $f(x)$ de variable real *se define* la expansión de Taylor como:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \, (x - x_0)^n \ , \qquad C_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n} f(x) \Big|_{x=x_0} \ ,$$

en donde la sucesión de coeficientes C_n es convergente en algún dominio alrededor del punto x_0. La expansión de Taylor nos permite definir $f(x)$ para puntos vecinos en el plano complejo (*Continuación Analítica*).

Por ejemplo, consideremos la función $1/(1+x^2)$ y su expansión de Taylor:

$$\frac{1}{1+x^2} = 1 - x^2 + x^4 - x^6 + \ldots$$

Esta serie es convergente sólo para $-1 < x < 1$. Sin embargo la función esta bien definida para cualquier valor de la variable x. Para entender esta aparente contradicción tenemos que ir al plano complejo y definir la serie

$$1 - z^2 + z^4 - z^6 + \ldots$$

El *radio de convergencia* de la serie se define como la distancia más pequeña a la primera singularidad. En este caso se tiene que para $z = \pm i$, $\dfrac{1}{1+z^2} \rightarrow \infty$, por lo tanto el radio de convergencia de la serie es $z^* = 1$.

Para una función $f(z)$, de variable compleja, diferenciable

$$f(z) = u(x,y) + i\,v(x,y)\ ; \quad z = x + i\,y\,,$$

$$i \equiv \sqrt{-1}\,,$$

se satisfacen las condiciones de Cauchy-Riemann:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad ; \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$$

$\Rightarrow$ continuidad y diferenciabilidad[1] de $f(z)$.

De aquí podemos obtener que:

$$\nabla^2 u = \nabla^2 v = 0$$

u, v se llaman *funciones armónicas.*

Ejemplo

$$f(z) = z^2 = \underbrace{x^2 - y^2}_{\text{función armónica}} + 2ixy$$

4.2 Tipos de Funciones Analíticas

Una función *analítica* es una función que esta determinada localmente por una serie de potencias convergente (su serie de Taylor). Existen tres tipos de funciones analíticas:

- **Regulares** (o de una hoja -one-sheeted)
  $f(z)$ es regular a lo largo de cualquier trayectoria. Esto implica que $\forall z$ existe un radio finito de convergencia para la expansión de Taylor.

[1] Las condiciones de Cauchy-Riemann aseguran que la derivada no depende del camino que sigamos para conseguir el límite $\Delta z \to 0$.

Ejemplos

- $f(z) =$ constante
- $f(z) = z^n, \quad n \in \mathbb{Z}$ (excluido $z = \infty$)

- **Singulares** (irregulares, de varias hojas -multi-Sheeted) Tienen singularidades aisladas a lo largo de alguna trayectoria.

- **Fronteras Naturales**
  Estas tienen secuencias densas de singularidades; si conocemos a $f(z)$ dentro de una región acotada por una frontera, entonces no podemos conocer a la función afuera de dicha frontera.

4.3 Funciones Singulares

4.3.1 Singularidades Aisladas (Polos)

$$f(z)\Big|_{z=a} = \infty\,.$$

El límite no depende de cómo nos acerquemos a $z = a$.

Si

$$(z-a)^n f(z) \overset{z\to a}{=} \text{constante} \neq 0\,,$$

se dice que $z = a$, es un *polo de orden-n*.

Ejemplos:

$$f(z) = \frac{1}{(z-a)^n}\,, \quad (\text{polo de orden } n \text{ en } z = a)\,.$$

$$f(z) = \frac{1}{z^2}\,, \quad (\text{polo de orden 2 en } z = 0)\,.$$

Si $n = 1$ se tiene un *polo simple*. En general

$$f(z) \simeq \frac{C_n}{(z-a)^n}; \qquad C_n \equiv \text{residuo}.$$

Otro Ejemplo

$$f(z) = z^n ,$$

para $z = \infty$, se tiene un polo de orden-n.

Las funciones *enteras* sólo tienen singularidades en $x \to \infty$. Por ejemplo los polinomios $f = P_n(z)$, o la función $f = e^z$.

4.3.2 Singularidades Esenciales

Una singularidad esencial ocurre en un punto para el cual el valor de la función tiene diferentes valores cuando nos acercamos a tal punto. Por ejemplo para la función $e^{-\frac{1}{z}}$ en $z = 0$:

$$\lim_{z\to 0^+} e^{-\frac{1}{z}} = e^{-\infty} = 0, \qquad z > 0$$

$$\lim_{z\to 0^-} e^{-\frac{1}{z}} = e^{+\infty} = \infty, \qquad z < 0$$

4.3.3 Puntos Rama (Branch Points)

1. Algebraicos: $f \sim a(z-b)^{-n}$, $\quad n$: racional (no-entero)

2. Logarítmicos (No-Algebraicos)

Vamos a introducir algunos conceptos con un ejemplo:

4.3.4 Función $\sqrt{z}$

Consideremos la función *raíz cuadrada*:

$$f(z) = z^{\frac{1}{2}} .$$

Sabemos que hay una ambigüedad en el signo de la raíz: $\pm x^{\frac{1}{2}}$. ¿Cuál es el origen de esta ambigüedad?

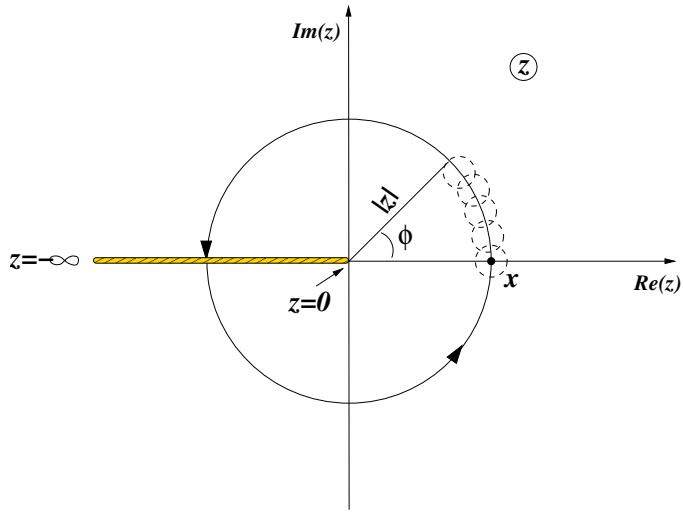


Figura 4.1: Continuación analítica para la función $\sqrt{z}$. El punto *rama* (*branch point*) se encuentra en $z = 0$, y el *corte* se toma arbitrariamente como la línea que va de $z = 0$ a $z = -\infty$ sobre el eje real.

Supongamos que sabemos que nuestra función en el punto x es la raíz positiva $+x^{\frac{1}{2}}$. Ahora vamos a hacer una continuación analítica al plano complejo:

$$f\,(z) = |z|^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\phi}{2}}\,; \qquad z = |z|e^{i\phi}$$

Si seguimos una trayectoria en el plano complejo girando 360^o en contra de las manecillas del reloj a partir de $z = x$, manteniendo $|z|$ fija, regresamos al mismo punto pero el signo de la raíz cambia!, es decir, comenzando con

$$z = |z|e^{i\phi}, \quad (|z| = x, \phi = 0) \quad \Rightarrow \quad \sqrt{z} = +|z|^{1/2}$$

llegamos a

$$\phi = 0 + 2\pi \quad \Rightarrow \quad \sqrt{z} = |z|^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\,2\pi}{2}} = -|z|^{1/2}$$

lo cual es una aparentemente una contradicción! Para resolver esta situación podemos pensar que el punto al cual regresamos después de dar una vuelta de 360° se encuentra en "*otra hoja*" del plano complejo. Ahora bien, si rotamos una vez más (alrededor del punto rama), regresaremos al mismo punto!

Podemos imaginar que existe una línea imaginaria (o *corte*) en el plano complejo de z en donde se unen las *hojas*[2]. Así la transición de una hoja a otra se hace cruzando el *corte* (o *Branch Cut*, en inglés). Decimos que la primera *hoja* es *Física*. Por lo tanto, y dependiendo de la trayectoria que sigamos en el plano complejo z, tendremos valores diferentes para la función. De esta manera, la introducción de un *corte* nos permite definir sin ambigüedad una función multivaluada, con tal de que no se crucen los cortes. Un *corte* es en general una curva en el plano complejo a través de la cual una función analítica multivaluada es discontinua.

Por ejemplo, en el caso de nuestra función $\sqrt{z}$, tomemos un punto sobre el corte (véase la Fig.4.1) y consideremos la diferencia entre los valores de la función en cada "*orilla*" del corte:

$$\Delta f = f\left(z + i0\right) - f\left(z - i0\right) = 2i|z|^{\frac{1}{2}}\,,$$

esta es la discontinuidad ó salto de la función $\sqrt{z}$ a través del corte.

Mas generalmente, para una función de la forma

$$f\left(z\right) = z^{\alpha}\,,$$

se tiene que:

[2]Aunque el *corte* lo podemos elegir arbitrariamente, normalmente para la función $\sqrt{z}$ se toma la línea que va de $z = 0$ a $z = -\infty$ sobre el eje real.

- Si α es racional; $\alpha = \frac{n}{m}$, se tiene un punto rama de orden m.

$$|z|^{\frac{n}{m}} e^{i\frac{n}{m}\phi},$$

y la función tiene m hojas.

- Si α es irracional, se tiene un número infinito de hojas. Lo que implica que **jamás** vamos a regresar al punto original si rodeamos al punto rama. Este es un ejemplo de un *punto rama logarítmico* o *no-algebraico.*

Un ejemplo del caso α = irracional esta dado por la función logaritmo

$$f(z) = \ln(z),$$
$$z = |z| e^{i\phi + i2\pi n} \Rightarrow$$
$$f(z) = \ln|z| + i(\phi + 2\pi n)$$

$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$

En particular si $\phi = 0$, es decir z es un número real, se tiene que

$$f(z) = \ln|z| + i2\pi n, \qquad z \in \mathbb{R}.$$

Para finalizar vamos a dar algunos ejemplos de los diferentes tipos de funciones analíticas:

1. $P_n(z)$ Polinomios de la variable compleja z de grado n. Tienen un polo de orden n-ésimo en $z = \infty$.

2. $e^z, \sin(z), \cos(z)$. Tienen singularidades esenciales en $z = \infty$.

3. $\tan(z), \cot(z)$. Son funciones meromórficas (sólo tiene polos), y una singularidad esencial en $z = \infty$.

Problemas:

- Investigar la función $f(z) = \tan(z)$.
- Investigar la función $f(z) = z^z$, desde el punto de vista de sus singularidades.

  Solución:

$$z^z = e^{\ln(z^z)} = e^{z(\ln(z))}, \qquad \text{con} \quad z = |z|e^{i\phi} \Rightarrow$$

$$z^z = e^{|z|\,(\ln|z| + i(\phi + 2n\pi))}$$

LECCIÓN 5

Problema espectral de dos niveles

5.1 Estudio de la Ecuación Cuadrática

La solución de la ecuación de Schrödinger en problemas reales es, en general, muy difícil. Antes de tratar de resolver problemas mas complicados vamos a estudiar el caso simple de un problema de dos niveles (Landau y Zener). Los métodos que vamos a explorar son la Teoría de Perturbaciones y el Análisis Asintótico de las soluciones.

5.1.1 Propiedades analíticas de los eigenvalores

Consideremos el siguiente problema espectral

$$T\phi = \lambda\phi\,, \tag{5.1}$$

con T una matriz hermitiana (simétrica) 2×2:

$$T = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix},$$

en donde a, b, y c son números reales. La ecuación característica correspondiente la podemos escribir convenientemente como

$$\lambda^2 - 2A\lambda - B = 0\,, \tag{5.2}$$

con $A \equiv \frac{1}{2}(a+c) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,T$, y $B \equiv b^2 - ac = -\det T$. La ecuación (5.2) es una ecuación cuadrática en el parámetro espectral λ.

Explícitamente las soluciones de la ecuación característica (5.2) son

$$\lambda_\pm = A \pm \sqrt{A^2 + B}\,.$$

Consideremos ahora el problema espectral como función del parámetro A, es decir

$$\lambda = \lambda\,(A)\ .$$

Esta función tiene dos puntos rama[1] en $A_\pm = \pm i\sqrt{B}$, por lo que podemos introducir dos cortes en el plano complejo A como se ve en la Figura (5.1).

Inmediatamente vemos que si conocemos una de las soluciones, digamos λ_+, entonces podemos encontrar la segunda solución si recorremos una trayectoria en el plano complejo que cruce a uno de los cortes, i.e.

$$\lambda_+(A) \to \lambda_-\,(A)\ .$$

De manera más precisa:

$$\lambda_+\,(A) = A + (A^2+B)^{\frac{1}{2}} \quad \underset{\text{Continuación Analítica}}{\to} \quad \lambda_-\,(A) = A - (A^2+B)^{\frac{1}{2}}$$

[1]Correspondientes al punto rama $z = 0$ de la función $\sqrt{z}$.

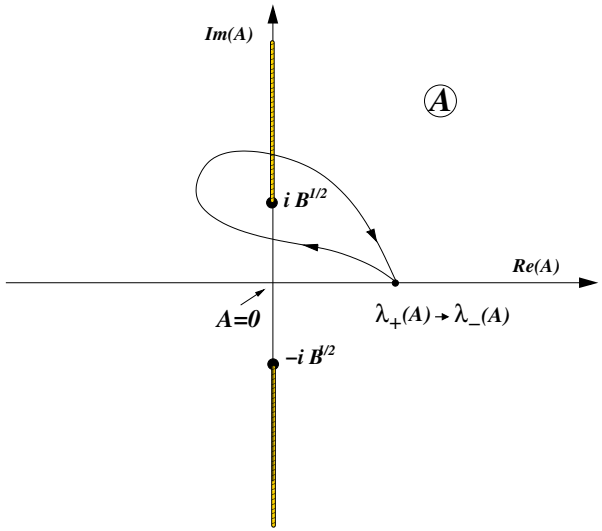


Figura 5.1: Estructura analítica de las soluciones de las soluciones de la ecuación cuadrática $\lambda^2 - 2A\lambda - B = 0$ en el plano complejo A. Ambas soluciones están conectadas analíticamente mediante cualquier trayectoria arbitraria que cruce un corte.

Al cruzar el corte ganamos una fase (signo) en la raíz cuadrada $\sqrt{} \to -\sqrt{}$, y por lo tanto vamos de una solución a la otra.

En particular los puntos rama corresponden a los puntos del plano complejo en donde ambas soluciones coinciden (i.e. $\lambda_+ = \lambda_-$). La condición necesaria y suficiente para que las dos raíces de la ecuación cuadrática coincidan es que su *discriminante*[2] se anule, i.e.

$$D = 4(A^2 + B) = (\lambda_+ - \lambda_-)^2 = 0\,,$$

es decir, en $A = \pm i\sqrt{B}$ (véase la Figura 5.1).

[2]En general $D = \prod_{i<j}^{n}(x_i - x_j)^2$.

Por otra parte, si $A^2 + B =$ const. positiva $= \mathsf{a}^2$, entonces $\lambda_{1,2} = A \pm \mathsf{a}$, y no hay singularidad, esto implica que se tienen 2 hojas de Riemann separadas. Este es un caso muy especial en donde las raíces no están conectadas!. En Mecánica Cuántica esta situación la encontramos en los problemas exactamente solubles (como el Oscilador Armónico, el potencial de Pöschl-Teller, el potencial de Coulomb y el potencial de Morse).

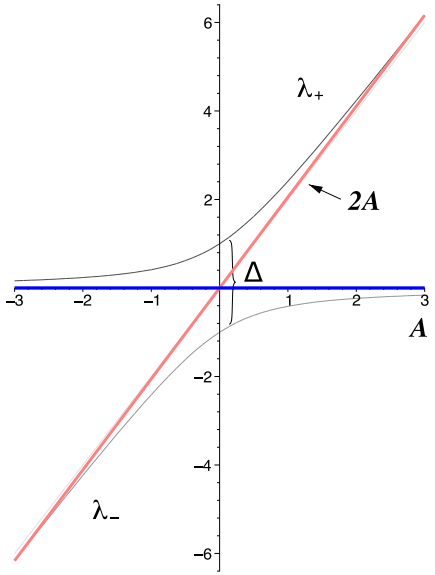


Figura 5.2: Comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación característica del problema de dos niveles (ecuación cuadrática (5.2)) como función del parámetro A para $B > 0$ fijo (véase el texto). El gap es $\Delta = 2\sqrt{B}$.

5.1.2 Análisis Asintótico

Ahora vamos a considerar el comportamiento de las soluciones de la ecuación característica cuando $A \to \pm\infty$ con $B \geq 0$. Tomemos primeramente λ_+:

$$\lambda_+ = A + \left(A^2 + B\right)^{1/2}$$

i) Si $A \to +\infty \Rightarrow$

$$\lambda_+ = A + A\left(1 + \frac{B}{A^2}\right)^{1/2} \simeq A + A\left(1 + \frac{1}{2}\frac{B}{A^2} + \ldots\right)$$
$$= 2A + \frac{B}{2A} + \ldots$$

ii) Si $A \to -\infty \Rightarrow$

$$\lambda_+ = A + |A| \left(1 + \frac{B}{A^2}\right)^{1/2} \simeq A + |A| \left(1 + \frac{1}{2}\frac{B}{A^2} + \dots\right)$$
$$= \frac{B}{2|A|} + \dots$$

Del mismo modo podemos analizar el comportamiento asintótico de la segunda solución λ_-:

$$\lambda_- = A - \left(A^2 + B\right)^{1/2}$$

i) Si $A \to +\infty \Rightarrow$

$$\lambda_- = A - A \left(1 + \frac{B}{A^2}\right)^{1/2} \simeq A - A \left(1 + \frac{1}{2}\frac{B}{A^2} + \dots\right)$$
$$= -\frac{B}{2A} + \dots$$

ii) Si $A \to -\infty \Rightarrow$

$$\lambda_- = A - |A| \left(1 + \frac{B}{A^2}\right)^{1/2} \simeq A - |A| \left(1 + \frac{1}{2}\frac{B}{A^2} + \dots\right)$$
$$= 2A - \frac{B}{2|A|} + \dots$$

5.1.3 Quasi Crossing

La distancia más corta entre las soluciones λ_+ y λ_- ocurre para $A = 0$:

$$\Delta = (\lambda_+ - \lambda_-)\Big|_{A=0} = 2(A^2 + B)^{1/2}\Big|_{A=0} = 2B^{\frac{1}{2}},$$

de modo que el parámetro B *mide* en cierta forma la *repulsión* entre las soluciones (*niveles*). Cuando $B \to 0$ los niveles parecen cruzarse. A este fenómeno se le conoce como *Quasi Crossing*. Es un fenómeno que ha sido observado experimentalmente y ha sido descrito por el presente análisis conocido como Teoría de Landau, Wigner y Zener.

5.1.4 Modos Cero (Zero Modes)

¿Qué pasa cuando $B = 0$? En este caso las soluciones exactas de la ecuación cuadrática son $\lambda = 2A$ y $\lambda = 0$ (!) Ha ocurrido un rearreglo muy particular de las curvas $\lambda_+(A), \lambda_-(A)$ (véase la Figura). Ha aparecido un tipo de rompimiento de continuidad. También el *gap* entre los puntos rama ha desaparecido.

Recordando la definición del parámetro B inmediatamente vemos que $B = 0 \Rightarrow \det T = 0$. Es decir que la matriz T no es invertible. Entonces debemos demandar que T sea invertible para no tener esta patología.

Commentario:

Al eigenvalor idénticamente cero ($\lambda = 0$), se le denomina como modo cero (zero mode). Este tipo de soluciones particulares requieren de una atención muy especial. En electrodinámica cuántica, por ejemplo, el fotón tiene masa cero ($m = 0$), igual que en QCD (Cromo-Dinámica Cuántica) los gluones no tienen masa. Esto corresponde a la aparición de modos cero en las ecuaciones de campo correspondientes. Estos modos cero se manifiestan por la aparición de divergencias infrarrojas en algunas integrales

$$\int_0 dE \ .$$

Para regularizar estas integrales (y tener integrales finitas) se pone $\int_{m^2 \neq 0} dE$ y luego se toma el límite $m \to 0$. Tómese en cuenta que, de no hacerse adecuadamente, se pueden ganar problemas complejos.

5.2 Teoría de Perturbaciones $_{\mathbf{I}}$ (T.P.)

5.2.1 Significado de la teoría perturbativa

Supongamos que tenemos un objeto (una ecuación algebraica, una ecuación diferencial, una ecuación integral, etc.) y que por una u otra razón nuestro problema contiene un parámetro pequeño λ (en caso de no tenerlo podemos inventarlo). Por ejemplo, supongamos que tenemos una ecuación

$$f(x,\lambda) = 0 \qquad \lambda - \text{parámetro pequeño} \ , \tag{5.3}$$

y queremos encontrar una solución. Vamos a proponer esta solución en forma de serie de potencias en λ:

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \lambda^n \ , \tag{5.4}$$

substituyendo (5.4) en (5.3) se obtiene:

$$f\left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n x_n, \lambda\right) = 0 = \sum \lambda^n F_n\left(x_0, \ldots x_n\right) \ ,$$

omitiendo algunas sutilezas. De aquí que

$$\begin{array}{lll} F_0 = 0 & = f(x, \lambda = 0) & \\ F_1 = 0 & \Rightarrow & x_1 = x_1(x_0) \\ F_2 = 0 & \Rightarrow & x_2 = x_2(x_1, x_0) \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

Es muy importante que la primera de estas ecuaciones se pueda resolver para el coeficiente x_0 (en este caso la aproximación a la solución es $x = x_0$). Una vez resuelta la primera ecuación podremos intentar resolver la segunda ecuación para x_1 y así sucesivamente. Entonces obtendremos un proceso iterativo para aproximar la solución. A veces la gente le llama a este método como *el método de Newton.*

5.2.2 Primera forma perturbativa de la ecuación cuadrática

Vamos a introducir el concepto de teoría perturbativa como una forma de aproximar las soluciones de una ecuación algebraica. En particular vamos a suponer que no conocemos las soluciones de la ecuación cuadrática

$$x^2 - 2Ax - B = 0\,, \tag{5.5}$$

y vamos a introducir un parámetro *pequeño* λ enfrente del término cuadrático[3]:

$$\lambda x^2 - 2Ax - B = 0\,. \tag{5.6}$$

Vamos a suponer que las soluciones tienen una representación en serie de potencias en el parámetro λ de la forma

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \lambda^n\,, \tag{5.7}$$

en donde los coeficientes x_n son nuestras incógnitas. Substituyendo esta serie en la ecuación (5.6) se obtiene

$$\lambda \left(x_0 + \lambda x_1 + \lambda^2 x_2 + \lambda^3 x_3 + ...\right)^2$$
$$-2A \left(x_0 + \lambda x_1 + \lambda^2 x_2 + \lambda^3 x_3 + ...\right) - B = 0\,.$$

Juntando términos con la misma potencia de λ, se obtiene la serie (de Taylor):

$$\underbrace{\left(-2Ax_0 - B\right)}_{F_0}\lambda^0 + \underbrace{\left(x_0^2 - 2Ax_1\right)}_{F_1}\lambda^1$$
$$+ \underbrace{\left(2x_0x_1 - 2Ax_2\right)}_{F_2}\lambda^2 + \underbrace{\left(x_1^2 + 2x_0x_2 - 2Ax_3\right)}_{F_3}\lambda^3 + ... = 0$$

[3]En particular cuando $\lambda = 0$, la ecuación resultante si la podemos resolver (!)

$$-2Ax - B = 0 \quad \Rightarrow \quad x = x_0 = -\frac{B}{2A}\,.$$

en donde cada uno de los coeficientes F_n se tiene que anular, de donde se obtienen los coeficientes

$$\begin{aligned} x_0 &= -\frac{1}{2}\frac{B}{A} \\ x_1 &= +\frac{1}{8}\frac{B^2}{A^3} \\ x_2 &= -\frac{1}{16}\frac{B^3}{A^5} \\ x_3 &= +\frac{5}{128}\frac{B^4}{A^7} \\ &\dots \end{aligned} \tag{5.8}$$

De aquí podemos adivinar la estructura de los términos en la serie perturbativa:

$$x_n = c_n \frac{B^{n+1}}{A^{2n+1}} \, .$$

en donde los c_n son ciertos coeficientes numéricos que usualmente no son difíciles de encontrar.

Ahora olvidemos la suposición de que λ es pequeño (en realidad todos los cálculos anteriores no dependen de λ ya que es un parámetro auxiliar). Para esto necesitamos que la serie (5.7) sea convergente para toda λ, es decir cuando el radio de convergencia[4] λ^* es ∞. Supongamos que $\lambda^* > 1$, entonces para $\lambda = 1$ la serie converge. Por otra parte si $\lambda^* < 1$ entonces podemos intentar hacer una continuación analítica al punto $\lambda = 1$. Esto lo podemos hacer siempre, con excepción del caso en que $\lambda^* = 0$, situación que ocurre frecuentemente en problemas físicos. En este caso hay que buscar otros métodos.

[4]Recordemos que el *radio de convergencia* λ^* en un punto se define como la distancia más pequeña a la primera singularidad. Por ejemplo para $\dfrac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots$ se tiene que para $x = 1 \, , \Rightarrow \dfrac{1}{1-x} \to \infty$, por lo tanto el radio de convergencia de la serie es $x^* = 1$.

Tenemos pues las siguientes situaciones:

1. $\lambda^* > 1 \quad \Rightarrow$ la serie converge para $\lambda = 1$

2. $\lambda^* < 1 \quad \Rightarrow$ Podemos hacer una continuación analítica para ir al punto $\lambda = 1$. Para esto es necesario conocer todos los coeficientes F_n pero en problemas reales no podemos conocer todos los coeficientes, sólo en algunos casos. Entonces, el procedimiento existe formalmente, pero es casi imposible llevarlo a cabo.

3. $\lambda^* = 0 \quad \Rightarrow$ En este caso la serie no tiene sentido.

Volvamos al caso de la serie (5.8). Es claro que la suma corresponde a la solución[5] ($\lambda = 1$)

$$x_- = A - \left(A^2 + B\right)^{\frac{1}{2}} .$$

Mediante este procedimiento hemos encontrado una de las dos soluciones. ¿Qué se necesita hacer para encontrar la otra solución?

Aquí tenemos un problema de *Bifurcación*:

$$-2Ax - B = 0 \quad \Rightarrow \quad 1\,\text{solución},$$

si agregamos λx^2:

$$\lambda x^2 - 2Ax - B = 0 \quad \Rightarrow \quad 2\,\text{soluciones (!)}$$

Esto es un cambio cualitativo en la resolución del problema.

[5]como la función $\sqrt{}$ tiene dos signos, i.e. $\pm\sqrt{}$ podemos recuperar la otra solución $x_+ = A + \left(A^2 + B\right)^{\frac{1}{2}}$ mediante continuación analítica.

¿Cuál es el origen de esta patología? Por supuesto sabemos que la solución exacta de la ecuación (5.6) es

$$x_{\pm} = \frac{A \pm (A^2 + \lambda B)^{\frac{1}{2}}}{\lambda} .$$

Si hacemos una expansión la raíz cuadrada obtenemos

$$\left(A^2 + \lambda B\right)^{\frac{1}{2}} \;=\; A + \frac{\lambda B}{2A} + \ldots$$

Entonces

$$x = \begin{cases} x_- \approx -\frac{B}{2A} \\ x_+ \approx \frac{2A}{\lambda} \end{cases}$$

Inmediatamente observamos que la solución x_+ no tiene una expansión de Taylor, aunque si tiene una expansión de Laurent:

$$x_+ = \frac{2A + \frac{\lambda B}{2A} + 0\left(\lambda^2\right)}{\lambda} = \frac{2A}{\lambda} + \frac{B}{2A} + 0\left(\lambda\right) , \qquad (5.9)$$

en donde el primer término $\frac{2A}{\lambda}$ es singular en λ. Además, cuando

$$\lambda \to 0 \qquad \begin{cases} x_- = -\frac{B}{2A} \\ \\ x_+ \to \infty \end{cases}$$

Entonces cuando hacemos perturbaciones alrededor de $\lambda = 0$, una solución la tenemos en $x_- = -\frac{B}{2A}$ (c.f. ec (5.8)) y la otra solución esta en infinito. Es necesario hacer algo inteligente para resolver esta situación.

5.2.3 Segunda forma perturbativa de la ecuación cuadrática

Supongamos ahora que en la ecuación (5.6) el parámetro B es pequeño. Supongamos por ejemplo que $B = 0$. En este caso

las soluciones son

$$x_- = 0\,,$$
$$x_+ = \frac{2A}{\lambda}\,.$$

Ahora vamos a desarrollar la Teoría Perturbativa de las soluciones de la ecuación cuadrática (5.6) en potencias del parámetro B. Suponemos entonces que[6]

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n\, B^n\,.$$

Sustituyendo en la ecuación (5.6) obtenemos

$$\lambda\left(B^0x_0 + B^1x_1 + B^2x_2 + B^3x_3 + ...\right)^2$$
$$-2A\left(B^0x_0 + B^1x_1 + B^2x_2 + B^3x_3 + \ldots\right) - B = 0\,.$$

Juntando términos

$$B^0|\lambda x_0^2 - 2Ax_0 = 0 \qquad \Rightarrow x_0 = \begin{cases} x_- = 0 \\ x_+ = \frac{2A}{\lambda} \end{cases} \tag{5.10}$$

$$B^1|2\lambda x_0x_1 - 2Ax_1 - 1 = 0 \qquad \Rightarrow x_1 = \frac{1}{2\lambda x_0 - 2A} = \begin{cases} -\frac{1}{2A} \\ +\frac{1}{2A} \end{cases}$$

$$B^2|\lambda\left(x_1^2 + 2x_0x_2\right) - 2Ax_2 = 0 \quad \Rightarrow x_2 = -\frac{\lambda x_1^2}{2\lambda x_0 - 2A} = \begin{cases} +\frac{\lambda}{8A^3} \\ -\frac{\lambda}{8A^3} \end{cases}$$

[6] Aquí los coeficientes x_n son diferentes a los coeficientes de la expansión en potencias de λ (Ec. 5.7), aunque por simplicidad mantenemos la misma notación.

La primera ecuación tiene dos soluciones (!). La solución de la segunda ecuación (lineal) nos da x_1, la primera corrección a cada una de las dos soluciones $x_\pm$, y la siguiente ecuación (también lineal) nos da la segunda corrección x_2, y así sucesivamente, de tal forma que para el coeficiente delante de B^n, la ecuación a resolver es lineal en x_n. Es fácil ver que el radio de convergencia de esta expansión en potencias de B, es muy grande. De hecho[7]

$$B^* = \frac{A^2}{\lambda} \,,$$

Sin embargo, cuando $A = 0 \Rightarrow B^* = 0$ (!), y tenemos una degeneración, pues las dos soluciones coinciden en este caso. ¿Qué hacer?

5.2.4 Tercera forma perturbativa de la ecuación cuadrática

Supongamos pues que A es un parámetro pequeño y que podemos aproximar las soluciones de la ecuación cuadrática en serie de potencias de A:

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} A^n x_n \,.$$

Procediendo del mismo modo que antes obtenemos

$$A^0|\lambda x_0^2 - B = 0 \Rightarrow \qquad x_0 = \pm\sqrt{\frac{B}{\lambda}} \tag{5.11}$$

$$A^1|2\lambda x_0 x_1 - 2x_0 = 0 \Rightarrow \qquad x_1 = \frac{1}{\lambda}$$

$$A^2|\lambda\left(x_1^2 + 2x_0 x_2\right) - 2x_1 = 0 \Rightarrow \quad x_2 = -\frac{\lambda x_1^2 - 2x_1}{2\lambda x_0} = \frac{1}{2\lambda^2}\sqrt{\frac{\lambda}{B}}$$

[7] de la solución exacta sabemos que $x_\pm = \frac{A \pm \left(A^2 + \lambda B\right)^{\frac{1}{2}}}{\lambda}$.

Hemos obtenido dos soluciones, y una vez más hemos obtenido una ecuación lineal para x_1 (!). Tal vez esta sea una propiedad general. En este caso podemos decir que para cualquier problema *no lineal* la Teoría de Perturbaciones se reduce a un problema lineal (*Linearización*).

El radio de convergencia de esta serie es:

$$A^* = (\lambda B)^{\frac{1}{2}} \ ,$$

el cual es finito para toda λ y B diferentes de cero.

Soluciones complejas

Una pregunta de interés es si el procedimiento perturbativo anterior puede describir soluciones complejas. Esto se deja como una Tarea al lector.

¿Cuál es la Conclusión?

Si queremos estudiar el problema en forma general tenemos que aplicar diferentes tipos de Teoría de Perturbaciones, dependiendo del dominio que se quiera estudiar.

Tarea

Se le pide mucha seriedad al *lector*. Se trata de resolver la *Ecuación Cúbica*

$$\lambda x^3 - 2Ax^2 + Bx + 2C^2 = 0 \ . \tag{5.12}$$

Se le pide al *lector* estudiar las soluciones de ésta ecuación mediante Teoría de Perturbaciones y el Análisis Asintótico.

Aquí tenemos cuatro parámetros: λ, A, B, C.

1. Estudie las diferentes formas perturbativas, respecto de cada uno de los parámetros de la ecuación:

   - λ es pequeño $\rightarrow x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \lambda^n$, x_0 es una solución de la ecuación $-2Ax_0^2 + Bx_0 + 2C^2 = 0$. ¿Cuáles son los primeros coeficientes x_1, x_2?

- A es pequeño $\rightarrow x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n A^n$. ¿Cuáles son los primeros coeficientes x_0, x_1, x_2?
- B es pequeño $\rightarrow x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n B^n$. ¿Cuáles son los primeros coeficientes x_0, x_1, x_2?
- C es pequeño $\rightarrow x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n C^n$. ¿Cuáles son los primeros coeficientes x_0, x_1, x_2?

2. Estudie las diferentes formas asintóticas, respecto de cada uno de los parámetros de la ecuación (5.12).

3. Suponemos que conocemos tres raíces $x_0 = a, b, c$. Calcular la primera corrección a estas raíces en la ecuación (5.12).

5.3 Análisis Asintótico (Interpolación)

Para introducir el concepto del análisis asintótico regresemos al caso particular de la ecuación cuadrática Ec. (5.5):

$$x^2 - 2Ax - B = 0\,.$$

Hemos visto en la sección (5.1.2) que el comportamiento asintótico de la soluciones (a partir de las soluciones exactas[8]) cuando $A \rightarrow \pm\infty$ es

$$x_+ = \begin{cases} 2A \\ \dfrac{B}{2|A|} \end{cases} \quad , \qquad x_- = \begin{cases} -\dfrac{B}{2\,A} & A \rightarrow +\infty\ , \\ 2\,A & A \rightarrow -\infty\ . \end{cases}$$

Este comportamiento asintótico también lo podemos obtener de las propiedades de la ecuación cuadrática. A continuación describimos el procedimiento:

[8] De las soluciones exactas obtenemos: $x_+ = 2A + \frac{B}{2A} - \frac{B^2}{8A^3} + \mathcal{O}(A^{-5})$ y $x_- = -\frac{B}{2A} + \frac{B^2}{8A^3} + \mathcal{O}(A^{-5})$

- $A \to +\infty$. Para determinar el comportamiento dominante suponemos que la solución se comporta como una ley de potencias[9]

$$x = \alpha A^{\beta} + \mathcal{O}(A^{\beta}) \ , \tag{5.13}$$

en donde α y β son ahora nuestras nuevas incógnitas. Sustituyendo (5.13) en la ecuación cuadrática obtenemos

$$\alpha^2 A^{2\beta} - 2\alpha A^{\beta+1} - B = 0 \ . \tag{5.14}$$

Para poder continuar debemos hacer una suposición general sobre el parámetro β. Por ejemplo, podemos suponer que, o bien β es positivo, o β es negativo. Vamos a considerar ambas posibilidades:

- Supongamos que $\beta > 0$. En este caso los dos primeros términos de la ecuación (5.14) crecerán cuando $A \to \infty$ y podemos por tanto despreciar el último término (constante $-B$). En consecuencia, para satisfacer la identidad resultante, es necesario que los términos restantes tengan el mismo orden

$$2\beta = \beta + 1 \qquad \Rightarrow \qquad \beta = 1 \ ,$$

y que el coeficiente respectivo se anule:

$$\alpha^2 - 2\alpha = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = 2 \ .$$

Por lo tanto, el comportamiento asintótico resulta ser

$$x = 2A + \mathcal{O}\left(A\right) \ ,$$

y corresponde con la solución x_+.

[9]Comportamientos asintóticos logarítmicos del tipo $x \simeq \alpha \log^{\beta} A$ nunca aparecen en las ecuaciones algebraicas.

- Ahora supongamos que $\beta < 0$. En este caso el primer término de la ecuación (5.14) tiende a cero cuando $A \to \infty$ y podemos despreciarlo. Ahora, para resolver la identidad resultante necesitamos que

$$\beta + 1 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \beta = -1 \ ,$$

$$-2\alpha - B = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = -B/2 \ .$$

Por lo tanto, el comportamiento asintótico resulta ser

$$x = -\frac{B}{2A} + \mathcal{O}\left(A^{-1}\right) \ ,$$

correspondiente a la solución x_- .

- $A \to -\infty$. Nuevamente suponemos que el comportamiento de la solución es de la forma (5.13). Consideramos los casos $\beta > 0$ y $\beta < 0$:

  - $\beta > 0$. En este caso el primer término en (5.14) es positivo y crece cuando $A \to -\infty$. Podemos por lo tanto despreciar el último término en (5.14) para obtener

$$\alpha^2 A^{2\beta} - 2\alpha A^{\beta+1} = 0 \ ,$$

de donde obtenemos que $2\beta = \beta + 1 \ , \Rightarrow \beta = 1$, $\alpha = 2$, *i.e.*

$$x = 2A + \mathcal{O}\left(A\right) \ ,$$

correspondiente a la solución x_-. Aquí conviene enfatizar que este comportamiento asintótico para $A \to -\infty$ es el mismo que obtuvimos en el caso anterior cuando $A \to \infty$, pero que corresponde a una solución diferente.

  - $\beta < 0$. En este caso podemos ver las siguientes situaciones:

(a) Si $-1 < \beta < 0$, no es posible satisfacer la identidad (5.14).

(b) $\beta = -1$ si hay una solución. La identidad resultante es

$$\frac{\alpha^2}{A^2} - 2\alpha - B = 0\,.$$

El primer término es positivo y tiende a cero cuando $A \to -\infty$. Entonces, en este caso obtenemos $\alpha = -\dfrac{B}{2}$ y por lo tanto

$$x = -\frac{B}{2\,A} + \mathcal{O}(1/A) = +\frac{B}{2\,|A|} + \mathcal{O}(1/A)\,,$$

correspondiente a la solución x_+.
(c) $\beta < -1$ no existe solución alguna.

5.3.1 Términos subdominantes

El procedimiento anterior no sólo nos permite encontrar el término principal en el comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación cuadrática (5.5), sino también nos sirve para encontrar el siguiente término - el término subdominante. Para ejemplificar esto, vamos a considerar el caso

$$x_+ \simeq 2A + \mathcal{O}\,(A)\;, \qquad A \to \infty\;.$$

Podemos suponer pues, que el siguiente término en la expansión asintótica tiene la forma

$$\sim \alpha' A^{\beta'}\,, \qquad \beta' < 1\,.$$

Entonces, substituyendo el Ansatz $x = 2A + \alpha' A^{\beta'}$ en la ecuación cuadrática obtenemos

$$2\alpha'\,A^{\beta'+1} + {\alpha'}^{\,2}\,A^{2\beta'} - B = 0\,. \tag{5.15}$$

Para encontrar los parámetros α', β' podemos suponer que dos términos son del mismo orden:

- Por ejemplo, si comparamos los dos primeros términos obtenemos $\beta' + 1 = 2\beta'$, es decir $\beta' = 1$, pero esto esta en contradicción con la suposición de que estamos buscando un término subdominante con $\beta' < 1$.
- Si comparamos los órdenes del primer término y del tercero $\beta' + 1 = 0$, con lo cual obtenemos

$$\beta' = -1\,, \quad \alpha' = \frac{B}{2},$$

y por tanto

$$x_+ \simeq 2A + \frac{B}{2A} + \ldots$$

- Si comparamos los órdenes de los dos últimos términos obtenemos $\beta' = 0$, con lo cual el primer término crecería cuando $A \to \infty$ y no podríamos entonces satisfacer la identidad (5.15).

5.3.2 Interpolación

No sabemos cuáles de las soluciones asintóticas obtenidas corresponden a una misma solución. Veamos si podemos encontrar una interpolación. Después de algunas meditaciones, podemos decir que existe una sola función que interpola los comportamientos obtenidos:

$$x_\pm = A \pm \left(A^2 + B\right)^{\frac{1}{2}}\ .$$

Se le deja al Lector (a razón de una Tarea) que piense si existe otra solución?

Es claro que podríamos pensar, por ejemplo, que siempre se puede introducir en la interpolación un factor de la forma $\frac{P_n(A)}{Q_n(A)}$, si

$$\frac{P_n\,(A)}{Q_n\,(A)} \quad \to \quad 1\,, \quad \text{cuando } A \to \pm\infty\,.$$

Se le pide al Lector de manera informal que trate de encontrar otra(s) interpolación(es)

Tarea

¿Es posible hacer Interpolaciones para las raíces de la ecuación Cúbica?

Tarea

Cuando estudiamos el problema espectral en representaciones matriciales de tamaño finito (bloques) no se dijo nada sobre la noción de *convergencia* del método. En realidad, este sigue siendo un problema abierto, aunque la mayoría de la gente piensa que el método es convergente[10].

Cuando estudiamos el problema de dos niveles (caso 2×2)

$$\begin{vmatrix} a & c \\ c & b \end{vmatrix} \Rightarrow \lambda^2 - 2A\lambda - B = 0\,,$$

encontramos dos puntos rama en $A = \pm iB^{\frac{1}{2}}$ en donde las soluciones (eigenvalores) coinciden. Es decir, encontramos que ambos eigenvalores están conectados analíticamente. Vamos a proponer ahora el siguiente

[10]Es decir que a medida que aumentamos el tamaño de los bloques (incluyendo cada vez más elementos de una base) el método es convergente.

Tarea

En el problema de tres niveles (caso 3×3)

$$\begin{vmatrix} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{vmatrix} \qquad \Rightarrow \lambda^3 - 2A\lambda^2 - B\lambda + C = 0\,,$$

Problema: Encuentre explícitamente los puntos rama de las soluciones para la ecuación característica del problema espectral de 3 niveles en el plano complejo de A en términos de B y C. En particular, la simetría de la matriz hermitiana nos dicta la forma en que están distribuidos los puntos rama. (El problema se presenta difícil, no sabemos la solución explicita).

El esquema es válido para n-dimensiones. Todas las raíces del polinomio característico se encuentran conectadas analíticamente en una superficie Riemanniana de n-hojas, y en donde se tienen puntos rama asociados con el punto rama de la raíz cuadrada $\sqrt{\ }$.

Problema: Considere el potencial anarmónico

$$V = x^2 + gx^4\,,$$

y la base ortonormal de eigenfunciones del oscilador armónico

$$\psi_n = H_n(x)\, e^{-\frac{x^2}{2}}\,, \quad n = 0, 1, \ldots \tag{5.16}$$

en donde $H_n(x)$ son polinomios de Hermite. Encuentre la representación matricial del Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\partial_x^2 + x^2 + gx^4\,,$$

en la base (5.16) (debidamente normalizada). Los elementos de matriz se denotarán como

$$h_{ij} = (\psi_i, \mathcal{H}\psi_j) \ .$$

Las integrales necesarias aparecen en los manuales. Dado que $(\psi_n, \mathcal{H}\psi_k) = 0$ si $n - k = impar$, podemos considerar una matriz para los estados pares, exclusivamente, y otra matriz para los estados impares[11].

Considere los casos

(a) 2×2:

$$\begin{vmatrix} h_{00} & h_{02} \\ h_{20} & h_{22} \end{vmatrix} ,$$

en donde $h_{02} = h_{20}$, y

(b) 3×3:

$$\begin{vmatrix} h_{00} & h_{02} & h_{04} \\ h_{20} & h_{22} & h_{24} \\ h_{40} & h_{42} & h_{44} \end{vmatrix}$$

en donde $h_{02} = h_{20}$, $h_{04} = h_{40}$, $h_{24} = h_{42}$. Encuentre las energías en ambos casos y compare. Se sugiere usar la siguiente notación para dichas energías

$$E_0^{2\times 2}, E_2^{2\times 2},$$

$$E_0^{3\times 3}, E_2^{3\times 3}, E_4^{3\times 3} ,$$

$$\ldots \text{etc.}$$

Es importante señalar que cuando usamos una base finita, como en el caso anterior, y

[11] Como el potencial es una función *par* en la variable x, i.e. $V(-x) = V(x)$, sus eigenfunciones tienen una paridad definida.

vemos el comportamiento de las soluciones para g grande, inmediatamente encontramos una patología: $E \propto g$, pero se sabe que $E \propto g^{\frac{1}{3}}$. Nunca vamos a reproducir este comportamiento con una base finita (!).

LECCIÓN 6

Teoría de Perturbaciones II

En el capítulo anterior nuestro tratamiento del problema espectral en términos de una representación matricial de tamaño finito fue esencialmente no-perturbativo debido a que no teníamos parámetros pequeños en el método. Ahora veremos la aproximación perturbativa para resolver la ecuación de Schrödinger

$$\mathcal{H}\psi = -\psi'' + V\psi = E\psi \ , \qquad \psi \in \mathcal{L}^2 \ . \tag{6.1}$$

Supongamos que nuestro problema tiene un parámetro pequeño λ, y que el potencial se puede escribir como

$$V = V_0 + \lambda V_1 \ , \tag{6.2}$$

donde V_1 es una *perturbación* al potencial V_0 que corresponde a un problema exactamente soluble. Entonces la aproximación perturbativa consiste en suponer que la energía tiene una representación en serie de potencias de λ de la forma

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_n \ , \tag{6.3}$$

en donde los coeficientes E_n son ciertas constantes a determinar. Mientras que la aproximación para la energía es algebraica, tenemos además un elemento nuevo: tenemos también una forma perturbativa para las eigenfunciones, en serie de potencias de λ de la forma

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \Psi_n(x) \ \Rightarrow \quad \text{Rayleigh-Schrödinger P.T.} \tag{6.4}$$

en donde los coeficientes $\Psi_n(x)$ son ciertas funciones a determinar. La teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger es una teoría aditiva en el sentido de que las correcciones perturbativas, tanto a la energía como a las funciones de onda, son precisamente aditivas. En los siguientes capítulos veremos otros tipos de teorías perturbativas no-aditivas. La teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger se encuentra descrita en todos los libros de texto de Mecánica Cuántica por lo que no lo vamos a ver en mucho detalle.

6.1 T.P. de Rayleigh-Schrödinger

En la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger, las aproximaciones a las energías (6.3), y a las eigenfunciones (6.4) se hacen para cualquier estado del operador $\mathcal{H}$ por lo que podemos escribir de forma mas general

$$E^{(k)} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_n^{(k)} \ , \quad \psi^{(k)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \Psi_n^{(k)}(x) \ , \tag{6.5}$$

en donde el superíndice $^{(k)}$ se referirá al k-ésimo estado excitado del operador $\mathcal{H}$.

Sustituyendo las expansiones (6.5) en la ecuación de Schrödinger

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda V_1)\psi^{(k)} = E^{(k)}\psi^{(k)}\,,$$

c.f. (6.1), se obtiene

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda V_1)\left(\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n \Psi_n^{(k)}(x)\right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty}\lambda^p E_p^{(k)}\right)\left(\sum_{q=0}^{\infty}\lambda^q \Psi_q^{(k)}(x)\right). \tag{6.6}$$

Ahora, juntando términos con la misma potencia de λ se obtiene, orden por orden:

- $\lambda^0\Big|$ $\quad \mathcal{H}_0\Psi_0^{(k)} = E_0^{(k)}\Psi_0^{(k)}\,,$ o equivalentemente:

$$\left(\mathcal{H}_0 - E_0^{(k)}\right)\Psi_0^{(k)} = 0,$$

  la aproximación de orden cero corresponde precisamente al problema no-perturbado, i.e. $\Psi_0^{(k)}$ es la eigenfunción exacta, y $E_0^{(k)}$ la energía correspondiente, del k-ésimo estado del operador $\mathcal{H}_0$.

- $\lambda\Big|$ $\quad \mathcal{H}_0\Psi_1^{(k)} + V_1\Psi_0^{(k)} = E_0^{(k)}\Psi_1^{(k)} + E_1^{(k)}\Psi_0^{(k)}\,, \Rightarrow$

  o, más convenientemente:

$$\left(\mathcal{H}_0 - E_0^{(k)}\right)\Psi_1^{(k)} = \left(E_1^{(k)} - V_1\right)\Psi_0^{(k)}\,. \tag{6.7}$$

  Aquí, nuestras nuevas incógnitas son: la primera corrección a la energía $E_1^{(k)}$ y la primera corrección a la función de onda $\Psi_1^{(k)}$ del estado k-ésimo. Entonces, como primer paso para resolver la ecuación anterior usamos la base

de eigenfunciones del operador $\mathcal{H}_0$ (i.e. $\{\Psi_0^{(m)}\}$), con lo cual expresamos a $\Psi_1^{(k)}$ como

$$\Psi_1^{(k)} = \sum_{m=0,(m\neq k)}^{\infty} C_m^{(k)} \Psi_0^{(m)} \,. \tag{6.8}$$

Es importante hacer notar que la primera corrección a la función de onda la buscamos en el complemento ortogonal a la función no-perturbada $\Psi_0^{(k)}$. Por esa razón en la suma en (6.8) se excluye el término $m = k$. Sustituyendo (6.8) en (6.7) y, usando el hecho de que las funciones $\Psi_0^{(m)}$ son eigenfunciones del operador $\mathcal{H}_0$, obtenemos

$$\sum_{m=0,(m\neq k)}^{\infty} C_m^{(k)} \left(E_0^{(m)} - E_0^{(k)}\right) \Psi_0^{(m)} = \left(E_1^{(k)} - V_1\right) \Psi_0^{(k)} \,. \tag{6.9}$$

Ahora, si multiplicamos escalarmente ambos lados de la ecuación (6.9) por[1] $\Psi_0^{(\ell)}$, $\ell \neq k$, y usando el hecho de que las eigenfunciones del operador $\mathcal{H}_0$ forman un conjunto ortonormal completo, llegamos a

$$C_\ell^{(k)} \left(E_0^{(\ell)} - E_0^{(k)}\right) = -(\Psi_0^{(\ell)}, V_1 \Psi_0^{(k)}) \equiv -V_1^{\ell k} \,, \, (\ell \neq k) \,,$$

de donde obtenemos inmediatamente la solución para los coeficientes[2] $C_m^{(k)}$ de la expansión (6.8):

$$C_m^{(k)} = -\frac{V_1^{mk}}{E_0^{(m)} - E_0^{(k)}} \,.$$

Entonces, la primera corrección a la función de onda esta dada por

$$\Psi_1^{(k)} = \sum_{m=0,(m\neq k)}^{\infty} \frac{V_1^{mk}}{E_0^{(k)} - E_0^{(m)}} \Psi_0^{(m)} \,. \tag{6.10}$$

[1] Es decir $(\Psi_0^{(\ell)}, \sum_{m=0,(m\neq k)}^{\infty} C_m^{(k)} \left(E_0^{(m)} - E_0^{(k)}\right) \Psi_0^{(m)}) = (\Psi_0^{(\ell)}, \left(E_1^{(k)} - V_1\right) \Psi_0^{(k)})$.

[2] (Cambiando la notación $\ell \to m$)

De igual manera, para obtener la primera corrección a la energía, multiplicamos ambos lados de la ecuación (6.9) por $\Psi_0^{(k)}$ e integramos. El lado izquierdo se anula, por lo que obtenemos

$$E_1^{(k)} - (\Psi_0^{(k)}, V_1 \Psi_0^{(k)}) = 0\,,$$

con lo que la primera corrección a la energía del k-ésimo estado es igual al valor de expectación del potencial perturbativo en el estado no-perturbado correspondiente:

$$E_1^{(k)} = (\Psi_0^{(k)}, V_1 \Psi_0^{(k)}) = V_1^{kk} = \langle V_1 \rangle_k\,. \tag{6.11}$$

Nótese que en este método es necesario, en principio, conocer todos los estados $\Psi_0^{(k)}$ del sistema no-perturbado, así como todos sus eigenvalores $E_0^{(k)}$. Esto implica que V_0 tiene que ser un *Potencial Exactamente Soluble*. Entonces, aunque el procedimiento es muy bello, sólo lo podemos aplicar de manera constructiva cuando $\mathcal{H}_0$ es exactamente soluble. Desafortunadamente sólo conocemos 4 potenciales de este tipo (véase la Tabla 6.1.1)

Tabla 6.1: Lista de Potenciales Exactamente Solubles y áreas de aplicación

1	$V_0 = x^2$	Oscilador Armónico
2	$V_0 = -\dfrac{1}{r}$	Problema Coulombiano 3-d
3	$V_0 = -\dfrac{A}{\cosh(x)}$	Pöschl-Teller (Solitones)
4	$V_0 = A\left(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}\right)$	Morse (Física Molecular)

No se incluye el pozo cuadrado infinito.

Tarea

Determine las fórmulas para la segunda corrección en la T.P. de Rayleigh-Schrödinger.

Solución

- $\lambda^2 \Big|$ $\mathcal{H}_0\Psi_2^{(k)}+V_1\Psi_1^{(k)} = E_2^{(k)}\Psi_0^{(k)}+E_1^{(k)}\Psi_1^{(k)}+ E_0^{(k)}\Psi_2^{(k)}$, $\Rightarrow$

podemos reescribir esta ecuación como

$$\left(\mathcal{H}_0 - E_0^{(k)}\right)\Psi_2^{(k)} = E_2^{(k)}\Psi_0^{(k)} + \left(E_1^{(k)} - V_1\right)\Psi_1^{(k)}\,. \tag{6.12}$$

Es interesante observar que el operador en el lado izquierdo es el mismo que en la ecuación (6.7) para la primera corrección perturbativa.

Para obtener la segunda corrección a la energía podemos multiplicar la ecuación (6.12) por la izquierda por $\Psi_0^{(k)}$ e integrar para obtener

$$0 = E_2^{(k)} - (\Psi_0^{(k)}, V_1\,\Psi_1^{(k)})\,,$$

y usando la forma de $\Psi_1^{(k)}$ (Ec.6.10) obtenemos la fórmula para la segunda corrección de la energía

$$E_2^{(k)} = \sum_{m=0,(m\neq k)}^{\infty} \frac{V_1^{mk}\,V_1^{km}}{E_0^{(k)} - E_0^{(m)}}\,. \tag{6.13}$$

De esta fórmula se desprende una consecuencia muy importante: cuando se estudia el estado base ($k = 0$), todos los denominadores en la Ec. (6.13) son negativos (ya que $E_0^{(k=0)} < E_0^{(m)}$) y por lo tanto *la segunda corrección perturbativa a la energía del estado base siempre es negativa*, i.e.

$$E_2^{(0)} < 0\,.$$

Tabla 6.2: Lista de algunos Potenciales Perturbativos.

1	Oscilador Anarmónico	$V_1 = g\,x^4$
2	P. Coulombiano $+\vec{E}$ const. (Efecto Stark))	$V_1 = Ez$
3	P. Coulombiano $+\vec{B}$ const. (Efecto Zeeman))	$V_1 = B^2(x^2+y^2)$
4	Morse	$V_1 = e^{-3\alpha x}$

6.1.1 El potencial de oscilador anarmónico

Como ejemplo de aplicación de la teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger vamos a considerar el oscilador anarmónico en una dimensión:

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + gx^4\,. \tag{6.14}$$

El Hamiltoniano del sistema no-perturbado corresponde al del oscilador armónico:

$$\mathcal{H}_0^{\text{o.a.}} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2\ , \tag{6.15}$$

el potencial perturbativo es entonces

$$V_1 = x^4\ ,$$

y la constante de acoplamiento en (6.2) es $\lambda = g$.

Las eigenfunciones y eigenvalores del sistema no-perturbado (oscilador armónico (6.15)) son:

$$\Psi_0^{(n)}(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2^{n+1/2}\;n!}}\;H_n(x)\;e^{-x^2/2}\ , \tag{6.16}$$

$$E_0^{(n)} \;=\; 2\,n+1\ ,\quad n=0,1,2\ldots\ ,$$

en donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite con normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi}\, 2^n\, n!\, \delta_{n,m} \ ,$$

(ver Tabla B.1) de modo que las eigenfunciones $\Psi_0^{(n)}$ están normalizadas según:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^{(m)}(x) \Psi_0^{(n)}(x) dx = \delta_{m,n} \ .$$

Ahora, vamos a considerar las primeras dos correcciones a la energía del estado base $n = 0$. Para esto necesitamos los elementos de matriz del potencial perturbativo $V_1 = x^4$:

$$\langle n|x^4|0\rangle \ , \ n = 0, 1, 2 \ldots \ .$$

Es fácil ver que los únicos elementos de matriz diferentes de cero[3] son:

$$V_1^{00} = \langle 0|x^4|0\rangle = \frac{3}{4} \ , \tag{6.17}$$

$$V_1^{20} = \langle 2|x^4|0\rangle = \frac{3}{\sqrt{2}} \ , \tag{6.18}$$

$$V_1^{40} = \langle 4|x^4|0\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} \ , \tag{6.19}$$

Entonces, la primera corrección a la energía del estado base (que es igual al valor de expectación del potencial perturbativo, ec. (6.11)) es

$$E_1^{(0)} = \langle 0|V_1|0\rangle = \langle 0|x^4|0\rangle = \frac{3}{4} \, .$$

[3]Esto es fácil de ver si recordamos que el término x^4 puede expresarse en términos de polinomios de Hermite.

La segunda corrección a la energía, según la ecuación (6.13) es

$$E_2^{(0)} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{V_1^{m0}\, V_1^{0m}}{E_0^{(0)} - E_0^{(m)}} = \frac{|V_1^{20}|^2}{E_0^{(0)} - E_0^{(2)}} + \frac{|V_1^{40}|^2}{E_0^{(0)} - E_0^{(4)}}$$

$$= \frac{\left|\frac{3}{\sqrt{2}}\right|^2}{1-5} + \frac{\left|\sqrt{\frac{3}{2}}\right|^2}{1-9} = -\frac{21}{16}\,. \tag{6.20}$$

(c.f. (10.14)). Entonces, la energía del estado base del oscilador anarmónico (6.14) hasta el segundo orden es

$$E^{(0)} \simeq E_0^{(0)} + gE_1^{(0)} + g^2 E_2^{(0)} + \ldots = 1 + \frac{3}{4}g - \frac{21}{16}g^2 + \ldots\,. \tag{6.21}$$

Existen otros potenciales para los cuales existen sólo *algunas* soluciones exactas.

- Por ejemplo para

$$V = -\,(4n+3)\,x^2 + x^6,$$

$$\Psi_0 = e^{-\frac{x^4}{4}}\,, \quad (1 \text{ estado para}\,, n = 0)\,.$$

  Para $n \neq 0$, se conocen $(n+1)$ estados de paridad *par* $x \to -x$ en forma explícita. Situación física: Reacciones Químicas, ecuación Fokker-Planck con: $V = -3x^2 + x^6$.

- Para el potencial anarmónico

$$V = x^2 + gx^4\,,$$

  no se conoce *ningún* estado propio en forma explícita.

6.1.2 Otros Métodos Perturbativos

- $\psi(x) \;=\; \exp\left\{-\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\phi_n(x)\right\}$, T.P. Logarítmica

- $\psi(x) \;=\; \left(\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n f_n(x)\right)e^{-\phi_0}$, T.P. Dalgarno-Lewis

- $\psi(x) \;=\; \left(\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n f_n(x)\right)e^{-\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\phi_n}$, T.P. general (mixta)

LECCIÓN 7

El Problema Inverso de la Mecánica Cuántica

7.1 El Problema Inverso

El paradigma de un problema en la Mecánica Cuántica No-Relativista consiste en resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial dado V, y obtener con ello el espectro de energías y las funciones de onda correspondientes $\{E_n, \psi_n\}$:

$$\begin{array}{c} V \\ \Downarrow \\ \hat{H}\psi = E\psi \\ \Downarrow \\ \psi_n,\, E_n \end{array}$$

En el procedimiento inverso, se propone una función de onda plausible, que pudiera describir un estado físico (digamos, una función de onda ψ_0, que describa el estado base), y se determina el potencial para el cual, ésta función, es una eigenfunción exacta.

$$\begin{array}{c} \psi_0 \\ \Downarrow \\ \hat{H}\psi = E\psi \\ \Downarrow \\ V_0,\, E_0 \end{array}$$

Es decir, buscamos un potencial V_0 tal que

$$\mathcal{H}_0\psi_0 = -\psi_0'' + V_0\,\psi_0 = E_0\psi_0 \ ,$$

i.e. tal que

$$V_0 - E_0 = \frac{\psi_0''}{\psi_0} \ , \tag{7.1}$$

en donde E_0 es una constante (la energía correspondiente a ψ_0) la cual podemos poner como $E_0 = 0$, sin pérdida de generalidad[1]. De la definición (7.1) vemos que una condición necesaria para que el potencial V_0 no sea singular es que los nodos de ψ_0 se cancelen de alguna manera con los nodos de ψ_0''. Para una función ψ_0, que no tenga nodos (el estado base) el potencial asociado V_0 no tiene problemas con posibles singularidades.

Vamos a jugar un poco con este enfoque del problema inverso. Como primer ejemplo tomemos el caso en que la función ψ_0 es una función gaussiana de la forma

$$\psi_0 = \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \ , \quad x \in (-\infty, +\infty)\,. \tag{7.2}$$

Esta función, sin nodos, describe el estado base de un cierto potencial. ¿Cuál es este potencial? Usando la relación (7.1) obtenemos que

$$V_0 - E_0 \ = \ \frac{\psi_0''}{\psi_0} \ = \ x^2 - 1 \ .$$

[1]Esta selección equivale a una definición específica del nivel de referencia para la energía.

Inmediatamente reconocemos el potencial de un oscilador armónico con frecuencia unidad ($V_0 = x^2$). La energía correspondiente a ψ_0 es $E_0 = 1$.

Mas generalmente, la función

$$\psi_0 \;=\; \mathrm{e}^{-\frac{\omega\, x^2}{2}} \;, \tag{7.3}$$

representa el estado base de un oscilador armónico de frecuencia ω, y cuya energía es $E_0 = \omega$, i.e. $V_0 - E_0 = \omega^2\, x^2 - \omega$.

Si complexificamos un poco el problema, podemos considerar una función de onda con un nodo. Por ejemplo

$$\psi_0 \;=\; x\, \mathrm{e}^{-\frac{\omega\, x^2}{2}} \;\Rightarrow$$

$$V_0 - E_0 = \omega^2\, x^2 - 3\omega \;.$$

El potencial también es el de un oscilador armónico de frecuencia ω, pero la energía correspondiente es $E_0 = 3\omega$. De acuerdo con el teorema de Sturm esta función debe corresponder a la función asociada con el primer estado excitado del oscilador armónico, ya que tiene un nodo (en $x = 0$).

Tarea Escriba una función de onda similar a la anterior pero que describa un estado excitado con dos nodos. Determine el potencial correspondiente.

Hint: considere una función con un prefactor que tenga dos nodos simétricamente distribuidos en los puntos $x = \pm A$.

7.2 Problemas cuasiexactamente solubles

(Quasi-exactly-solvable QES systems)

7.2.1 Potencial séxtico

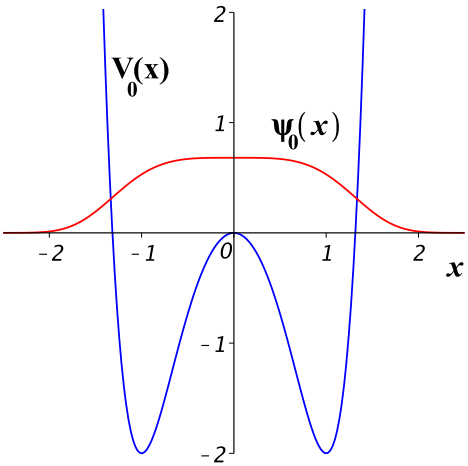


Figura 7.1: Potencial séxtico $V_0 = x^6 - 3x^2$ y la función de onda de su estado base $\psi_0(x) = e^{-x^4/4}$.

Siguiendo este procedimiento *inverso* nos preguntamos ahora lo siguiente: para la función de onda sin nodos

$$\psi_0 = \mathrm{e}^{-\frac{x^4}{4}}\,, \tag{7.4}$$

¿cuál es el potencial del cual ésta función de onda es una solución exacta? Nuevamente, usando la relación (7.1) obtenemos

$$V_0 - E_0 = x^6 - 3x^2\,, \quad (E_0 = 0)\,. \tag{7.5}$$

El potencial (7.5) es un potencial anarmónico muy particular de doble pozo muy no trivial, del cuál conocemos (por construcción) la eigenfunción exacta de su estado base, pero nada más (!).

La figura (7.1) muestra la forma del potencial (7.5) y la función de onda ψ_0 (7.4). Al contrario de lo que uno esperaría intuitivamente, la función de onda del estado base no tiene dos picos (dos máximos que corresponden a los mínimos del potencial), y sólo tiene un máximo (máxima probabilidad) en $x = 0$, que corresponde con el máximo del potencial en el cual la partícula se encuentra en una posición de inestabilidad! La energía del estado base es igual al máximo del potencial. Este comportamiento es muy particular del potencial (7.5), en particular, del valor del coeficiente numérico enfrente del término cuadrático. Una pequeña desviación de este valor cambia cualitativamente el comportamiento.

Continuando con esta estrategia podemos considerar ahora una función similar a la función (7.4) pero con un nodo en el prefactor de la forma

$$\psi_0 = x\, \mathrm{e}^{-\frac{x^4}{4}} \,. \tag{7.6}$$

Esta función corresponde a un primer estado excitado. El potencial asociado (7.1) para el cual la función (7.6) es una solución exacta de la ecuación de Schrödinger es

$$V_0 - E_0 \;=\; x^6 - 5x^2 \,, \quad (E_0 = 0) \,. \tag{7.7}$$

Naturalmente podemos proponer ahora una función similar a la función (7.4) pero con dos nodos simétricos en el prefactor de la forma

$$\psi_0 \;=\; (x^2 - A)\, \mathrm{e}^{-\frac{x^4}{4}} \,. \tag{7.8}$$

El potencial asociado para el cual la función (7.8) es una solución exacta de la ecuación de Schrödinger es

$$V_0 - E_0 \;=\; \frac{x^8 - Ax^6 - 7\,x^4 + 3\,Ax^2 + 2}{x^2 - A} \,. \tag{7.9}$$

Para eliminar la singularidad en el potencial podemos reescribir el numerador como

$$\begin{aligned} &(x^2 - A)(x^6 + \alpha x^4 + \beta x^2 + \gamma) \\ &= x^8 + (\alpha - A)\, x^6 + (\beta - A\alpha)\, x^4 + (\gamma - A\beta)\, x^2 - A\gamma \end{aligned}$$

y comparando con el numerador en (7.9), encontramos

$$\alpha = 0, \beta = -7, \gamma = -4A \quad \text{y} \quad 4A^2 = 2\,,$$

lo que implica que tenemos dos soluciones para las cuales es posible eliminar los polos simples en (7.9):

$$\begin{aligned} A_{\pm} &= \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\,, \\ \psi_0^{\pm} &= \left(x^2 \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^4}{4}}\,, \end{aligned} \tag{7.10}$$

que corresponden al mismo potencial

$$V_0 = x^6 - 7x^2\,, \tag{7.11}$$

con energías

$$E_0^{\pm} = \pm\frac{4}{\sqrt{2}}\,. \tag{7.12}$$

La solución ψ_0^-, ver (7.10), que no tiene nodos en el intervalo $x \in (-\infty, +\infty)$, corresponde al estado base con energía $E_0^- = -4/\sqrt{2}$, mientras que la solución ψ_0^+, que tiene dos nodos; en $x = \pm 1/\sqrt[4]{2}$, corresponde al segundo estado excitado con energía $E_0^+ = 4/\sqrt{2}$. El potencial (7.11) tiene dos soluciones exactas y representa un ejemplo de un sistema cuasiexactamente soluble.

En general, para el potencial

$$V_{n,p} = x^6 - (4n+2p+3)x^2\,,\ n = 0, 1, 2, \ldots\,,\ p = 0, 1\,, \tag{7.13}$$

conocemos de manera algebraica (usando métodos de álgebra lineal) $(n+1)$ estados excitados de paridad $(-1)^p$ con funciones de onda de la forma

$$\Psi_{n,p} = x^p\, P_n(x^2)\, \mathrm{e}^{-\frac{x^4}{4}}\,, \tag{7.14}$$

(ver A.V.Turbiner, *Communications in Mathematical Physics* **118**, 467-474 (1988)).

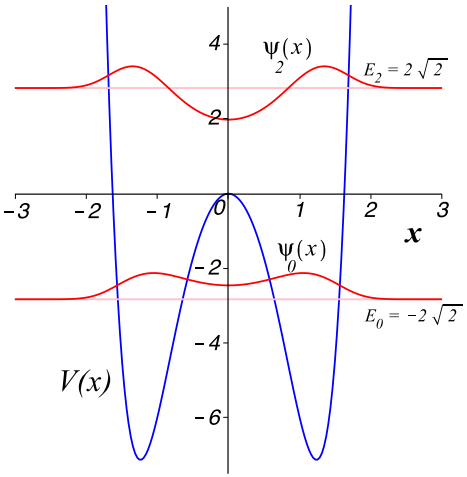


Figura 7.2: Potencial séxtico $V = x^6 - 7x^2$ y sus dos eigenfunciones exactas $\psi_{0,2}(x) = (x^2 \mp 1/\sqrt{2})\ e^{-\frac{x^4}{4}}$ del estado base (sin nodos) y del segundo estado excitado (con dos nodos), correspondientes a las energías $E_{0,2} = \pm 2\sqrt{2}$. Para las funciones de onda $\psi_{0,2}(x)$ el eje horizontal se ha desplazado para que coincida con los niveles de energía correspondientes.

7.2.2 Problema inverso en ecuación de Riccati

En muchos casos prácticos es conveniente escribir la función de onda en la forma exponencial

$$\psi(x) \ = \ e^{-\phi(x)} \ . \tag{7.15}$$

A la función $\phi(x)$ la designaremos como función *fase*.

En este caso el potencial asociado a la función de onda $\psi(x)$ esta dado por

$$V - E \ = \ \frac{\psi''}{\psi} = \phi'^2 - \phi'' \ .$$

Si definimos la función $y = \phi'$ obtenemos una ecuación diferencial ordinaria de primer orden no-lineal de Riccati:

$$E - V \ = y' - y^2 \ . \tag{7.16}$$

Esta ecuación define el potencial asociado en términos de la función y.

7.2.3 Potencial de oscilador armónico desde la perspectiva del problema inverso

Ejemplo 1: Si $\psi_0 = \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$, entonces $\phi_0 = \frac{x^2}{2}$, $y_0 = x$ con lo que obtenemos inmediatamente

$$E_0 - V_0 = y_0' - y_0^2 = 1 - x^2 \, .$$

Ejemplo 2: Si $\psi_1 = x\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$, entonces $\phi_1 = \frac{x^2}{2} - \ln(x)$, $y_1 = x - \frac{1}{x}$ con lo que obtenemos

$$E_1 - V_1 = y_1' - y_1^2 = 1 + \frac{1}{x^2} - (x - \frac{1}{x})^2 = 3 - x^2 \, .$$

Ejemplo 3: Si $\psi_2 = (x^2 - A)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$, entonces $\phi_2 = \frac{x^2}{2} - \ln(x^2 - A)$, $y_2 = x - \frac{2x}{x^2 - A}$ con lo que obtenemos el potencial asociado:

$$E_2 - V_2 = y_2' - y_2^2 =$$

$$1 - \frac{2}{x^2 - A} + \frac{4x^2}{(x^2 - A)^2} - x^2 + \frac{4x^2}{x^2 - A} - \frac{4x^2}{(x^2 - A)^2}$$

$$= 1 - x^2 + \frac{4x^2 - 2}{x^2 - A} \, .$$

de donde podemos identificar, por ejemplo, que $E_2 = 1$ y, a un potencial V_2 que tiene singularidades! Para salvar esta situación podemos elegir adecuadamente el parámetro A de

tal manera que estas singularidades del potencial se eliminen. Escribiendo

$$\frac{4x^2-2}{x^2-A} \;=\; 4\,\frac{x^2-\frac{1}{2}}{x^2-A} \;=\; 4\,, \quad \text{si}\, A=\tfrac{1}{2}\ ,$$

obtendremos nuevamente el potencial de oscilador armónico y una energía $E_2 = 5$:

$$E_2 - V_2 = 5 - x^2\ ,$$

correspondiente a la función de onda del estado excitado con dos nodos:

$$\psi_2 = \left(x^2-\tfrac{1}{2}\right)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \propto (4x^2-2)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} = H_2(x)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}\ ,$$

en donde $H_2(x)$ es el polinomio de Hermite de grado 2.

De los tres ejemplos presentados hemos visto que siempre hemos obtenido un potencial asociado (7.1) de oscilador armónico con energías $E_n = 2n+1$ con funciones de la forma $\psi_n = P_n(x)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$, en donde P_n es un polinomio de grado $n = 0, 1, 2$. Entonces podemos proponer el siguiente acercamiento:

Si $\psi_n = P_n(x)\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$, cuál es el potencial asociado y qué requerimientos debemos imponer a P_n para que el potencial resultante no tenga singularidades?

En este caso

$$\phi_n = \frac{x^2}{2} - \ln P_n(x)\ , \quad y_n = x - \frac{P_n'(x)}{P_n(x)}\ ,$$

por lo tanto

$$E_n - V_n \;=\; y_n' - y_n^2 = 1 - \frac{P_n''(x)}{P_n(x)} + \frac{P_n'^2(x)}{P_n^2(x)} - x^2 + 2x\frac{P_n'(x)}{P_n(x)} - \frac{P_n'^2(x)}{P_n^2(x)}$$

$$= \;1 - x^2 - \frac{P_n'' - 2xP_n'}{P_n}\ .$$

Ahora, si queremos recuperar un potencial de oscilador armónico, entonces en el último término la razón debe ser igual a una constante, digamos λ. Entonces, en este caso se requiere que todos los polinomios P_n satisfagan la ecuación

$$P_n'' \; - \; 2xP_n' \; + \; \lambda P_n \; = \; 0 \; .$$

Podemos reconocer inmediatamente que esta ecuación es precisamente la ecuación de Hermite(!), en donde $\lambda = 2n$. Por lo tanto obtenemos

$$E_n \; = \; 2n + 1 \; ,$$
$$\psi_n \; = \; H_n(x)\, \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \; .$$

7.2.4 Potencial de oscilador anarmónico desde el punto de vista de la teoría de perturbaciones

La forma del potencial $V_0 = x^6 - 3x^2$ (7.5), para el cual conocemos el estado base exactamente, es muy particular. ¿Qué podemos hacer para tratar el potencial séxtico más general (de dos términos) de la forma

$$V \; = \; x^6 \; + \; \alpha x^2 \; , \tag{7.17}$$

con el parámetro α arbitrario[2], a partir de la solución que ya conocemos ($\alpha = -3$)? – Una idea es intentar aplicar una teoría perturbativa con la perturbación

$$V_1 \; = \; V \; - \; V_0 \; = \; (\alpha - 3)\, x^2 \; ,$$

que en realidad es la desviación de potencial original y V_0. Pero hay otra idea: vamos a construir una función de onda ψ_0 que dé la descripción apropiada del comportamiento de la

[2]Para $\alpha > 0$ el parámetro α es en realidad el cuadrado de la frecuencia de la parte armónica del potencial.

función de onda exacta a distancias grandes y pequeñas. Después podemos usar la fórmula (7.1) para restaurar el potencial V_0. Es una muy buena idea pero en la práctica es muy difícil construir tal función de onda (y desarrollar la teoría de perturbaciones) cuando la función de onda *cambia* rápidamente, por ejemplo de manera polinomial a distancias pequeñas, y con un decaimiento exponencial a distancias grandes, es decir, cuando la función de onda del estado base se comporta como

- $|x| \to 0$
$$\psi_0 \sim |x|^\alpha, \qquad \alpha > 0 \ .$$
- $|x| \to \infty$
$$\psi_0 \sim e^{-a\, x^\beta} \ , \qquad a, \beta > 0 \ .$$

¿Cómo conjuntar estos dos comportamientos en una función haciendo una interpolación? – No es claro!

En particular, en el caso del Oscilador Anarmónico

$$V \ = \ x^2 \ + \ g x^{2k}, \quad k = 2, 3 \ldots . \tag{7.18}$$

El comportamiento asintótico de la función de onda del estado base es:

$$\Psi_0 \approx 1 \ - \ a x^2 \ + \ \ldots \ ,$$

cuando $|x|$ viene a cero[3], y

$$\Psi_0 \approx e^{-\frac{\sqrt{g}}{k+1}\, x^{k+1}} \ ,$$

cuando[4] $|x| \to \infty$.

[3]La ecuación de Schrödinger $-\Psi_0'' + (x^2 + g x^4)\Psi_0 = E\Psi_0$, en el límite cuando $|x| \to 0$ es $-\Psi_0'' = E\Psi_0$. Podemos suponer que la función de onda es par $\Psi_0(-x) = \Psi_0(x)$, y que tiene un comportamiento polinomial con los primeros términos $\Psi_0 \simeq 1 - a\, x^2$ (el signo es convencional), y $E = 2a$.

[4]Cuando $|x| \to \infty$, $\Psi_0(x) \to 0$ y podemos hacer el Ansatz $\Psi_0 \sim \mathrm{e}^{-\phi(x)}$. El término dominante en el potencial es $g x^{2k}$. La ecuación de Schrödinger en este límite implica que $\phi'' - \phi'^2 + g x^{2k} = 0$, de donde se obtiene la solución $\phi \sim \alpha x^{k+1}$, $\alpha = \frac{\sqrt{g}}{k+1}$.

La sugerencia es estudiar la fase exponencial ϕ en la representación (7.15) en lugar de la propia función de onda,

Usualmente, la fase exponencial ϕ es una función mucho más suave que ψ y es mucho más fácil hacer una interpolación de su comportamiento a distancias pequeñas y grandes. Por ejemplo, en caso del oscilador anarmónico (7.18),

$$\phi_0 \approx \; ax^2 \; + \; \ldots \; ,$$

cuando $|x|$ viene a cero[5], y

$$\phi_0 \approx \frac{\sqrt{g}}{k+1}\, x^{k+1} \; ,$$

cuando $|x| \to \infty$. La interpolación mas simple entre los dos comportamientos asintóticos es obvia:

$$\phi_{approx} = ax^2 + \frac{\sqrt{g}}{k+1}\, x^{k+1} \, .$$

Por esto, en la próxima lección vamos a desarrollar una teoría de perturbaciones para la fase exponencial.

[5] $\Psi_0 = \mathrm{e}^{-\phi_0} = 1 - ax^2 + \ldots$ como habíamos visto.

LECCIÓN 8

Teoría de Perturbaciones III

8.1 Una Teoría de perturbaciones multiplicativa

En este capítulo vamos a desarrollar una teoría perturbativa bajo la suposición de que la función de onda (del estado base) tiene una forma exponencial y cuya función exponente se desarrollará perturbativamente. Por lo tanto, esta es una teoría perturbativa multiplicativa.

Comencemos con la ecuación de Schrödinger (eligiendo $\hbar = 1, m = 1/2$):

$$-\Psi''(x) + (V - E)\,\Psi(x) = 0\,, \qquad x \in R\,. \tag{8.1}$$

Supongamos que la función de onda se puede escribir en la forma

$$\Psi(x) = e^{-\phi(x)}\,, \tag{8.2}$$

en donde denotaremos a la función $\phi(x)$ como *la fase* de la

función de onda. Entonces si calculamos las derivadas

$$\Psi' = -\phi'\, e^{-\phi(x)} \quad ,$$
$$\Psi'' = \left(-\phi'' + (\phi')^2\right) e^{-\phi(x)} \ ,$$

y sustituyendo en la ecuación de Schrödinger, se obtiene:

$$\left(\left\{\phi'' - (\phi')^2\right\} + (V - E)\right) e^{-\phi(x)} = 0,$$

es decir, que la ecuación de Schroedinger se transforma en una ecuación para la fase $\phi(x)$ de la forma

$$\phi'' - (\phi')^2 = E - V\,. \tag{8.3}$$

Esta ecuación es, por cierto, el punto inicial para desarrollar la aproximación semiclásica WKB (Wentzel, Krammer, Brillouin, (1926)) (en donde se cumple la condición $\phi'' \ll (\phi')^2$).

Ahora suponemos que el potencial de nuestro sistema físico se puede escribir como la suma de un potencial no-perturbado $V_0(x)$ mas un potencial perturbativo $V_1(x)$

$$V = V_0 + \lambda V_1\,, \tag{8.4}$$

y que conocemos las soluciones del potencial no-perturbado Aqui, λ es un parámetro pequeño. En particular suponemos que conocemos la función ϕ_0 para la cual se cumple

$$\phi_0'' - (\phi_0')^2 = E_0 - V_0\,.$$

De hecho, esta en nuestras manos la elección de V_0, ya que siempre podemos escribir $V = V_0 + (V - V_0)$.

A partir de aquí vamos a desarrollar una Teoría Perturbativa en donde vamos a hacer una expansión de la *fase* $\phi(x)$ y de la

energía E en serie de potencias del parámetro λ de la forma

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \phi_n(x) \ , \tag{8.5}$$

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_n \ .$$

Sustituyendo los desarrollos (8.5) en la ecuación (8.3), vamos a calcular paso a paso los coeficientes de la expansión:

Como ya es usual obtenemos

- $\lambda^0 \Big|$ $\quad \phi_0{}'' - (\phi_0{}')^2 = E_0 - V_0 \ ,$

  i.e. la aproximación de orden cero corresponde precisamente al problema no-perturbado.

- $\lambda \Big|$ $\quad \phi_1{}'' - 2\,\phi_0{}'\,\phi_1{}' = E_1 - V_1 \ \Rightarrow$

Podemos resolver fácilmente la última ecuación para ϕ_1. Para esto es conveniente definir primero la función $y_1 = \phi_1{}'$. Entonces obtenemos una ecuación diferencial lineal de primer orden para y_1:

$$y_1{}' - 2\,\phi_0{}'\,y_1 = E_1 - V_1.$$

Ahora, multiplicando ambos lados de la ecuación anterior por el factor integrante $\Psi_0^2 = (e^{-\phi_0})^2$, el lado izquierdo se puede escribir como

$$(y_1{}' - 2\,\phi_0{}'\,y_1)\,e^{-2\phi_0} \ = \ (y_1\,e^{-2\phi_0})' \ ,$$

e integrando, se obtiene

$$y_1(x)\Psi_0^2(x) = \int_{-\infty}^{x} (E_1 - V_1(x'))\,\Psi_0^2\,(x')\,d\,x' \, . \tag{8.6}$$

Esta ecuación es el punto de partida para obtener la primera corrección a la energía E_1, y la primera corrección y_1 (o ϕ_1) para la función $\phi(x)$. Con este fin, recordamos la cuestión de cuáles son las condiciones de frontera. En este caso sabemos que[1]

$$\Psi_0 \in L^2(R) \Rightarrow \Psi_0(x) = e^{-\phi_0(x)} \quad \Rightarrow \quad \lim_{|x|\to\infty} |\phi_0(x)| \to \infty ,$$

suponiendo que $\phi_0(x)$ no tiene singularidades para $x \in \mathbb{R}$. Entonces, como $\lim_{|x|\to\infty} \Psi_0(x) \to 0$, se obtiene que el lado izquierdo de (8.6) se anula cuando $x \to \infty$, con lo que se obtiene la relación

$$0 \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} (E_1 - V_1)\, \Psi_0^2(x')\, d\,x' \;.$$

Esta ecuación la podemos resolver para obtener la primera corrección a la energía:

$$E_1 \;=\; \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} V_1\, \Psi_0^2(x')\, d\,x'}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2(x')\, d\,x'} \;.$$

Este resultado coincide con el que se obtiene de la teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger. Esto es claro pues desde que tomamos $V = V_0 + \lambda_1 V$, lo que en realidad tenemos son diferentes formas, o diferentes realizaciones, de una misma Teoría Perturbativa.

Para que el lector no se sienta insatisfecho, vamos a formalizar las condiciones de frontera. Primero preguntémonos ¿Qué es un estado ligado?: La partícula se encuentra restringida a moverse principalmente en una región finita del espacio. De

[1] Puesta como condición débil esta condición no es constructiva!

forma más precisa, podemos decir que la *probabilidad* de encontrar a la partícula en $|x| \to \infty$, es infinitamente pequeña. La *corriente de probabilidad* [2] tiende a cero:

$$\lim_{|x|\to\infty} |j| \equiv \lim_{|x|\to\infty} \Psi\partial\Psi \to 0 \ , \ \partial \equiv \frac{d}{dx} \ ,$$

$$|\Psi\,\partial\Psi| \ = \ |e^{-\phi}\partial e^{-\phi}| \ = \ |e^{-2\phi}\,\phi'| \ = \ |\Psi^2\,y| \ \Rightarrow$$
$$\left(\Psi = e^{-\phi} \ , \quad y \ \equiv \ \phi'\right)$$
$$\lim_{|x|\to\infty} |\Psi^2\,y| \to 0 \ .$$

Compárese con la ecuación (8.6). De esta forma podemos decir que nuestra condición de frontera formalmente esta dada por

$$\lim_{|x|\to\infty} |\Psi_0^2 y_n| \to 0 \ .$$

Ahora vamos con la corrección n-ésima.

Sustituyendo las expansiones perturbativas (8.5) en la ecuación (8.3) se obtiene

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \phi_n'' - \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \phi_n' \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \phi_m' = \sum_{n=0} \lambda^n E_n - V_0 - \lambda V_1 \, ,$$

Entonces, escrita en forma conveniente (usando $y_n' = \phi_n'$), la relación para obtener la corrección de orden n esta dada por:

$$\lambda^n \Big| \qquad y_n{}' - 2y_0 y_n \ = \ E_n + \sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i} \equiv E_n - V_n \ ,$$

en donde se ha definido $-V_n \equiv \sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i}$. Detengámonos por un momento y pongamos atención en lo que tenemos aquí.

[2] Para la ecuación de Schrödinger, la ecuación de continuidad para la conservación de la probabilidad en una dimensión es $\frac{\partial\,\varrho}{\partial\,t} + \frac{\partial\,J}{\partial\,x} = 0$, en donde $\varrho = \Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$, y $J = i[\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}]$.

¿Qué significa la suma en el lado derecho del signo de igualdad? Es una suma de los términos calculados en los pasos previos. Es decir que, en cada corrección, tenemos que resolver la misma ecuación pero con lados derechos diferentes (en cada paso tenemos por lo tanto ecuaciones autosimilares).

Si al lado derecho le damos el significado físico de un potencial perturbativo, entonces en cada corrección estudiamos al sistema con respecto de perturbaciones diferentes, definidas por las correcciones anteriores, de modo que la relación para la corrección n-ésima se resuelve de manera similar a como se hizo para la primera corrección (!), i.e. a partir de la ecuación para la corrección n-ésima

$$y_n{}' - 2y_0 y_n = E_n - V_n$$

y multiplicando por el factor integrante Ψ_0^2, se obtiene

$$y_n \Psi_0^2 = \int_{-\infty}^{x} (E_n - V_n)\, \Psi_0^2\,(x')\, d\,x' \,.$$

Usando nuevamente las condiciones de frontera, se encuentra que la corrección n-ésima a la energía esta dada por

$$E_n = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} V_n \Psi_0^2\,(\,x)\, d\,x}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2\,(\,x)\, d\,x} \;, \tag{8.7}$$

con

$$V_n = -\sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i} \;.$$

Un aspecto sobresaliente de este procedimiento es el hecho de que para calcular la corrección n-ésima (8.7) solo es necesario conocer la función del estado base no-perturbado $\Psi_0(x)$, a diferencia del procedimiento de Rayleigh-Schroedinger.

8.1.1 Relación con la T.P. de Rayleigh-Schrödinger

Vamos a aprovechar la conexión con otras T.P. La expansión que estamos estudiando se puede escribir como

$$\Psi = e^{-\left(\phi_0+\lambda\phi_1+\lambda^2\phi_2+...\right)} \;=\; \Psi_0\, e^{-\left(\lambda\phi_1+\lambda^2\phi_2+...\right)} \;, \qquad (8.8)$$

mientras que en la Teoría de Rayleigh-Schrödinger la serie perturbativa es:

$$\Psi \;=\; \Psi_0 + \lambda\Psi_1 + \lambda^2\Psi_2 + \dots \;.$$

Expandiendo (8.8) se tiene:

$$\Psi \;=\; \Psi_0 \left(1 - \lambda\phi_1 + \lambda^2 \left(\frac{\phi_1^2}{2} - \phi_2\right) + ...\right) \;,$$

con lo que obtenemos las siguientes relaciones

$$\Psi_1 \;=\; -\phi_1\Psi_0 \;, \qquad (8.9)$$

$$\Psi_2 \;=\; \left(\frac{\phi_1^2}{2} - \phi_2\right)\Psi_0 \;, \qquad (8.10)$$

$$\dots$$

De la primera de estas ecuaciones obtenemos una *Regla de Suma* (Sum Rule). Usando para el lado izquierdo de (8.9) la forma explícita de la primera corrección a la función de onda del estado base en la TP de Rayleigh-Schrödinger ($\Psi_1^{(k=0)}$, ec. (6.10)), y para el lado derecho la relación $y_1 = \phi_1'$ y la ecuación (8.6) se obtiene

$$\sum_{n\neq 0}^{\infty} \frac{V_1^{n0}}{E^{(0)} - E^{(n)}}\, \Psi_0^{(n)}(x) \;=$$

$$= \; -\Psi_0(x) \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\left[\Psi_0(\xi)\right]^2} \int_{-\infty}^{\xi} \left(E_1 - V_1\right) \Psi_0^2\left(\,x'\right) d\,x'\, d\,\xi \;, \qquad (8.11)$$

en donde se ha puesto por simplicidad $\Psi_0^{(0)} \equiv \Psi_0$.

La Regla de Suma conecta objetos de diferente naturaleza: En el lado derecho tenemos una expresión que sólo depende del estado base y no sabe nada del espectro de energías. En el lado izquierdo, por otra parte, se tiene una suma que involucra a todos los estados del sistema no-perturbado (suma infinita). Hay que remarcar que el aspecto más notable en una Regla de Suma es que el lado derecho sí lo podemos calcular explícitamente (!).

Ejemplos más notables en física de Reglas de Suma:

1. Fórmula de Green: $\int$ interior $= \int$ superficie.
2. QCD Sum-Rules (Mikhail A. Shifman, A.I. Vainshtein, Valentin I. Zakharov, *Nucl. Phys.* **B** 147: 385-447, 1979) en la década de los setentas. Descubrimiento técnico que se encuentra entre los más citados. Expansión $e^{-\frac{1}{\gamma^2}}$.
3. Juan Maldacena. F. de Green para espacios multidimensionales. Conjetura de Maldacena (*Adv. Theor. Math. Phys.2: 231-252, 1998 (Int.J.Theor.Phys.38: 1113-1133, 1999)*. En Teoría de Branas en alguna superficie de una Teoría de Lazos sobre un Espacio de Minkowski.

Una Regla de Suma es una fórmula no trivial para calcular sumas infinitas.

A partir de la segunda corrección a la energía del estado base en la TP de Rayleigh-Schrödinger (ec. (6.13)) y la forma de

la segunda corrección en la presente teoría perturbativa (ec. (8.7)) también se obtiene una Regla de Suma:

$$E_2 = \sum_{n\neq 0}^{\infty} \frac{[V_1^{n0}]^2}{E^{(0)} - E^{(n)}} = \frac{-\int_{-\infty}^{+\infty} y_1^2(x)\, \Psi_0^2(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2(x) dx} \,. \qquad (8.12)$$

En donde se ha usado la definición $V_2 = -y_1^2$. Aquí se puede ver que esta segunda corrección (en el lado derecho) es siempre negativa al igual que en la T.P. de Rayleigh-Schrödinger (ya que $E^{(0)} < E^{(n)}$).

8.2 El oscilador armónico en el contexto de la TP multiplicativa

Ahora, como ilustración, vamos a resolver el problema de un oscilador armónico en el contexto de la teoría perturbativa desarrollada anteriormente.

Supongamos que queremos resolver la ecuación de Schroedinger para el potencial de un oscilador armónico de la forma

$$V = x^2 \,. \qquad (8.13)$$

Elijamos la función

$$\Psi_0 = e^{-\frac{\lambda x^2}{2}} \,, \qquad (8.14)$$

que es solución exacta del potencial[3]

$$V_0 = \lambda^2\, x^2 \,. \qquad (8.15)$$

Es importante notar que aqui λ no es el parámetro pequeño que hemos usado en n uestros desarrollos anteriores.

[3] $V_0 - E_0 = \Psi_0''(x)/\Psi_0(x) = \lambda^2 x^2 - \lambda$.

Si escribimos el potencial (8.13) como

$$\begin{aligned} V &= V_0 + (V - V_0) \\ &= \lambda^2 x^2 + (1 - \lambda^2) x^2 \,, \end{aligned}$$

podemos identificar el *potencial perturbativo* como

$$V_1 = (1 - \lambda^2) x^2. \tag{8.16}$$

Apliquemos ahora la teoría perturbativa para el potencial

$$V_0 + g V_1$$

en potencias de g. Comenzamos identificando la aproximación no-perturbada ($g = 0$):

$$y_0 = -(\ln \Psi_0)' = \lambda x \,, \quad E_0 = \lambda \,. \tag{8.17}$$

A continuación usamos la ecuación para la primera corrección perturbativa:

$$y_1{}' - 2 y_0 y_1 \;=\; E_1 - V_1 \;. \tag{8.18}$$

Sustituyendo y_0 (ec. (8.17)) y V_1 (ec. (8.16)) se obtiene

$$y_1' - 2\lambda x y_1 \;=\; E_1 - (1 - \lambda^2) x^2 \;. \tag{8.19}$$

Aqui podemos usar las fórmulas que derivamos anteriormente para calcular la primera corrección E_1 y y_1. Sin embargo, la solución es mas simple en este caso: observamos que el lado derecho de la ecuación (8.19) es un polinomio cuadrático. Entonces, la función y_1 en el lado izquierdo de (8.19) debe ser de la forma $y_1 = ax$. Efectivamente, cuando substituimos este Ansatz encontramos que $a = \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} = E_1$. Es decir

$$y_1 \;=\; E_1\, x, \quad E_1 \;=\; \frac{1 - \lambda^2}{2\lambda} \;. \tag{8.20}$$

Ahora calculemos la segunda corrección perturbativa. Recordemos que la ecuación que tenemos que resolver es

$$\begin{aligned} y_2' - 2\lambda x y_2 &= E_2 + y_1^2 \\ &= E_2 + \frac{(1-\lambda^2)^2}{4\lambda^2}\, x^2 \ . \end{aligned}$$

Nuevamente vemos que el *potencial perturbativo* en el lado derecho es similar al potencial perturbativo de la primera corrección, i.e. es un polinomio cuadrático en x, por lo que la solución debe ser de la forma $y_2 = ax$. Al substituir en la ecuación para la segunda corrección encontramos

$$y_2 \ = \ E_2\, x, \quad E_2 \ = \ -\frac{(1-\lambda^2)^2}{(2\lambda)^3} \ . \tag{8.21}$$

Obsérvese que esta segunda corrección es negativa, en acuerdo con la Teoría General.

Por razones pedagógicas vamos a calcular la tercera corrección. La ecuación a resolver es

$$\begin{aligned} {y_3}' - 2\lambda x\, y_3 &= E_3 + 2y_1 y_2 \\ &= E_3 - 2\frac{(1-\lambda^2)^3}{(2\lambda)^4}\, x^2 \ . \end{aligned}$$

Una vez más proponemos $y_3 = a\, x$. Sustituyendo obtenemos

$$y_3 \ = \ E_3\, x, \quad E_3 \ = \ 2\frac{(1-\lambda^2)^3}{(2\lambda)^5} \ . \tag{8.22}$$

El análisis anterior nos permite proponer como solución general para la corrección n-ésima

$$E_n \ = \ c_n \frac{(1-\lambda^2)^n}{(2\lambda)^{2n-1}}$$

con

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{2}, \\ c_1 &= 1, \\ c_2 &= -1, \\ c_3 &= 2, \\ &\dots \end{aligned}$$

Tarea. Se le pide al Lector encuentre la forma general del coeficiente c_n, es decir que encuentre la relación de recurrencia, para la serie c_n.

En el caso que estamos analizando podemos sumar la serie para la energía. El resultado nos da la energía exacta $E = 1$, es decir

$$1 \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} E_n \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(1-\lambda^2)^n}{(2\lambda)^{2n-1}} \;.$$

El Lector puede observar que el lado derecho de la ecuación anterior depende de λ, mientras que el lado izquierdo no.

Del mismo modo, la serie perturbativa para la función y es

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n y_n(x)\,, \quad y_n(x) = \phi_n'(x)\,,$$

en donde $y_n(x) = E_n\, x$, por lo que

$$y \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} g^n E_n x \;=\; x \sum_{n=0}^{\infty} g^n E_n \;,$$

y para $g = 1$:

$$y \;=\; x \;.$$

Como $\phi'(x) = y$, entonces $\phi(x) = \frac{x^2}{2}$ que es la solución exacta!

Una propiedad general:

Si consideramos la expansión de Taylor para la función y

$$y \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{2n+1} \;, \qquad a_0 \;=\; E$$

(si V es par y es impar)

$$\Rightarrow \qquad y'\Big|_{x=0} = E \qquad \text{Propiedad General}\,.$$

Es posible comprobar este resultado a partir de la ecuación

$$y' - y^2 \;=\; E - V \;,$$

ya que $V(x)$ es una función par, con $V(x = 0) = 0$, la función $y(x)$ es una función impar, y por lo tanto también $y(x = 0) = 0$.

LECCIÓN 9

Ecuación generalizada de Bloch

9.1 La ecuación de Riccati-Bloch

En algunas situaciones es conveniente transformar la ecuación de Schrödinger en una ecuación diferencial de primer orden no-lineal. Para ello escribimos la función de onda $\psi(x)$ en forma exponencial

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-\phi(x)} \ . \tag{9.1}$$

Substituyendo la función (9.1) en la ecuación de Schrödinger

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)\,,$$

obtenemos una ecuación[1] para la fase $\phi(x)$:

$$\phi'^2 - \phi'' = V - E\,. \tag{9.2}$$

[1]Esta ecuación ya la hemos obtenido en el capítulo anterior –ver ec. (8.3).

Si definimos la función $y = \phi' = -(\log \psi)'$ (llamada la derivada logarítmica de la función de onda), obtenemos una ecuación diferencial no-lineal de primer orden de Riccati [2] para la función y:

$$y' \; - \; y^2 \; = \; E \; - \; V \; . \tag{9.3}$$

En la práctica, en muchas ocasiones, es más fácil manipular esta ecuación que la ecuación de Schroedinger. A esta ecuación también se le conoce como ecuación de Bloch, de la aproximación WKB, ó ecuación eikonal. En particular, cuando el potencial tiene la forma $V = \frac{1}{g^2}\hat{V}(gx)$ con $g > 0$ vamos a *llamar* a la ecuación (9.3) como la ecuación de Riccati-Bloch:

$$y'(x) \; - \; y^2(x) \; = \; E \; - \; \frac{1}{g^2}\hat{V}(gx) \; . \tag{9.4}$$

9.2 Ecuación Generalizada de Bloch

Es conveniente transformar la ecuación (9.4) de la siguiente manera: si hacemos un cambio de variable conveniente

$$u \; = \; g\,x \; , \qquad y'_x \; = \; \frac{dy}{du}\frac{du}{dx} \; = \; g\,y'_u \; , \tag{9.5}$$

obtenemos

$$g\,y'_u - y^2(u) = E - \frac{1}{g^2}\hat{V}(u) \; . \tag{9.6}$$

Introduciendo una nueva función $z(u)$ mediante la relación

$$y(u) \equiv \frac{1}{g}z(u) \; , \tag{9.7}$$

sustituyendo en la ecuación (9.6) y multiplicando ambos lados de la ecuación por g^2, la ecuación (9.6) se transforma en

$$g^2 z'_u - z^2 = g^2 E - \hat{V}(u) \, . \tag{9.8}$$

[2] Una ecuación de Riccati (Conde Jacopo Francesco Riccati (1676-1754)) es cualquier ecuación diferencial ordinaria de primer orden no-lineal que es cuadrática en la función incógnita y tiene la forma general $y'(x) = q_0(x) + q_1(x)\,y(x) + q_2(x)\,y^2(x)$ en donde $q_0(x) \neq 0$ y $q_2(x) \neq 0$.

A esta ecuación le llamaremos *la ecuación Generalizada de Bloch*, y a la coordenada u la coordenada clásica (v. abajo).

Esta ecuación es particularmente útil cuando el potencial tiene una expansión de Taylor en la forma

$$V \equiv \frac{1}{g^2}\hat{V}(g\,x) \;=\; x^2 + a_1\, g x^3 + a_2\, g^2 x^4 + \ldots + a_p\, g^p x^{p+2} + \ldots \tag{9.9}$$

en donde g es una constante de acoplamiento, y $a_{1,2,\ldots}$ son parámetros adimensionales. Cuando $g \to 0$ reproducimos el potencial de oscilador armónico, $V \to x^2$. Entonces, estos potenciales son potenciales armónicos con correcciones anarmónicas. Es claro que cualquier potencial de dos términos $V \;=\; x^2 \;+\; a\, x^{2k}$ lo podemos escribir en esta forma.

En el caso en que la constante de acoplamiento sea pequeña podemos intentar resolver la ecuación de Riccati-Bloch y la ecuación Generalizada de Bloch usando la teoría perturbativa. A continuación vamos a explorar esta situación. Introducimos una expansión perturbativa para la función $z(u)$ y para la energía E en potencias de g^2 de la forma

$$z \;=\; \sum_{n=0} (g^2)^n\, z_n \;, \quad E \;=\; \sum_{n=0} (g^2)^n\, E_n \;. \tag{9.10}$$

En la ecuación generalizada de Bloch, el término de orden cero es

$$(g^2)^0 \Big| \qquad -z_0^2 \;=\; -\hat{V}(u) \;, \tag{9.11}$$

de donde se obtiene que

$$z_0(u) = \sqrt{\hat{V}(u)}\,, \tag{9.12}$$

que podemos interpretar como un *momento* clásico con energía cero [3]: $p_{\rm clas} = z_0$. Con esta analogía podemos construir una *acción*[4] clásica correspondiente:

$$S_{\rm clas} \sim \int p\, dx \sim \int z_0\, dx\, .$$

De este modo, la acción clásica aparece como un resultado de la Teoría Perturbativa en el orden más bajo. Recordando la definición de la función y en términos de la fase $y = \phi'(x)$ podemos identificar

$$\phi_0(x) \sim \int y_0(x)\, dx \sim \int z_0\, dx \sim S_{\rm clas}\ .$$

El siguiente término nos da la primera corrección

$$g^2 \Big| \qquad z_0' - 2z_0 z_1 \ = \ E_0\ . \tag{9.13}$$

Usualmente conocemos la energía del caso no perturbado E_0, entonces podemos resolver la ecuación anterior para obtener la primera corrección a la función $z(u)$:

$$z_1(u) = \frac{z_0' - E_0}{2\, z_0}\, . \tag{9.14}$$

Este resultado es único, ya que automáticamente hemos obtenido una corrección logarítmica en la expansión de la fase de la función de onda

$$\phi \simeq S_{\rm clas} + \log \Delta + \ldots$$

en donde el término logarítmico es de orden g^2, y Δ corresponde a un determinante que se encuentra en el método de punto silla para la integral de trayectorias de Feynman.

[3] La analogía se explica si escribimos $E = p^2/2m + V = 0$ entonces $p = \sqrt{-2mV}$.

[4] La acción abreviada se define como $\int p_i\, \dot{q}_i\, dt = \int p_i\, dq_i$.

Esta expansión perturbativa la aplicaremos al caso del oscilador anarmónico en el siguiente capítulo, en donde veremos que la solución en cada orden de la TP conduce a un procedimiento esencialmente algebraico.

9.3 Expansión perturbativa de la ecuación de Riccati-Bloch

Supongamos ahora que el potencial V en (9.3) puede escribirse como

$$V \;=\; V_0 \;+\; \lambda V_1 \;, \tag{9.15}$$

entonces podemos desarrollar una teoría perturbativa en potencias de λ para la ecuación (9.3) en la forma

$$E \;=\; \sum_{n=0} \lambda^n \, E_n \;, \quad y \;=\; \sum_{n=0} \lambda^n \, y_n(x) \;. \tag{9.16}$$

Substituyendo estas expansiones en la ecuación (9.3) [5] y juntando términos con la misma potencia de λ obtenemos

- $\lambda^0 \Big|$ $\qquad y_0{}' - y_0^2 \;=\; E_0 - V_0 \;,$

i.e. la aproximación de orden cero corresponde precisamente al problema no-perturbado. Por ejemplo, para el potencial no-perturbado de oscilador armónico $\psi_0 = e^{-x^2/2}$, $\phi_0 = x^2/2$, $y_0 = \phi_0' = x$ obtenemos

$$1 - x^2 = E_0 - V_0 \;.$$

- $\lambda \Big|$ $\qquad y_1{}' - 2\, y_0\, y_1 = E_1 - V_1 \;.$

[5] $\sum_n \lambda^n \, y_n' \;-\; \sum_{n,m} \lambda^{n+m} \, y_n \, y_m \;=\; \sum_n \lambda^n \, E_n \;-\; V_0 \;-\; \lambda V_1$

Esta es una ecuación diferencial de primer orden para la función incógnita y_1. Para resolver esta ecuación usamos un multiplicador integrante. Usando para el lado izquierdo la relación $(y_1\, e^{-2\phi_0})' = (y_1{}' - 2\, y_0\, y_1)\, e^{-2\phi_0}$, y definiendo $\Psi_0 = e^{-\phi_0}$, podemos integrar directamente el lado izquierdo para obtener

$$y_1(x)\Psi_0^2(x) = \int_{-\infty}^{x} (E_1 - V_1(x'))\, \Psi_0^2\,(x')\, d\,x' \ . \qquad (9.17)$$

El lado izquierdo es una corriente de probabilidad. Para los estados ligados las condiciones de frontera son

$$\Psi_0 \in L^2\,(R) \quad \Rightarrow \Psi_0(x) = e^{-\phi_0(x)} \quad \Rightarrow \lim_{|x|\to\infty} |\phi_0(x)| \to \infty\,.$$

Entonces, como $\lim_{|x|\to\infty} \Psi_0(x) \to 0$, se obtiene, a partir de (9.17):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (E_1 - V_1(x'))\, \Psi_0^2\,(x')\, d\,x' = 0$$

de lo cual podemos obtener la primera corrección a la energía:

$$E_1 = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} V_1(x')\, \Psi_0^2\,(x')\, d\,x'}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2\,(x')\, d\,x'}\ .$$

Este resultado es idéntico al que se obtiene con la teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger. Esto es más bien claro pues desde que tomamos el potencial en la forma $V = V_0 + \lambda_1 V$, lo que en realidad tenemos son diferentes formas, o diferentes realizaciones, de una misma Teoría Perturbativa.

Los siguientes términos tienen una forma similar:

- λ^2 $\quad y_2{}' - 2\, y_0\, y_2 \ = \ E_2 - V_2\,, \quad V_2 \equiv -y_1^2\ ,$

...

- $\lambda^n \Big|$ $\quad y_n{}' - 2\, y_0\, y_n \;=\; E_n - V_n\,, \quad V_n \equiv -\sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i}\,.$

El lado izquierdo del término general puede integrarse para obtener

$$y_n(x)\Psi_0^2(x) = \int_{-\infty}^{x} \left(E_n - V_n(x')\right) \Psi_0^2\left(x'\right) d\,x'\,, \tag{9.18}$$

y

$$E_n = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} V_n(x')\, \Psi_0^2\left(x'\right) d\,x'}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2\left(x'\right) d\,x'}\,. \tag{9.19}$$

Estados Excitados

Hasta ahora hemos supuesto implícitamente que en la representación exponencial de la función de onda $\psi(x) = \mathrm{e}^{-\phi(x)}$, la función fase $\phi(x)$ (o su derivada $y(x) = \phi'(x)$) tiene una expansión de la forma

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \phi_n(x)\,,$$

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n y_n(x)\,, \quad y_n(x) = \phi_n'(x)\,,$$

y que la función fase es una función analítica. Pero supongamos que $\psi(x)$ corresponde a la la función de onda de un estado excitado que podemos representar como

$$\psi(x) \;=\; P(x)\, \mathrm{e}^{-\phi(x)}\,,$$

en donde la función prefactor $P(x)$ contiene información acerca de los nodos. Claramente, la función $P(x)$ la podemos escribir como

$$P(x) \;=\; \prod_{i=1}^{p}(x - x_i)\;,$$

en donde $x_i, i = 1, 2 \ldots p$ corresponden a la posición de los nodos y p es el número de nodos. Naturalmente, podemos elevar el prefactor al exponente:

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\log P(x) - \phi(x)} = \mathrm{e}^{-\tilde{\phi}(x)}\,.$$

Entonces

$$\tilde{\phi}(x) = -\sum_{i=1}^{p} \log\,(x - x_i) + \phi(x)\,,$$

y para los estados excitados podemos suponer que la función $y(x)$ tiene la forma

$$\tilde{y}(x) = -\sum_{i=1}^{p} \frac{1}{x - x_i} + y(x)\,,$$

en donde $y(x)$ usualmente no tiene singularidades para $x \in \mathbb{R}$.

LECCIÓN 10

Oscilador Anarmónico

10.1 El Oscilador Anarmónico $V = x^2 + \lambda x^4$

Como ejemplo de aplicación de las técnicas perturbativas desarrolladas anteriormente vamos a considerar el muy importante caso de un oscilador anarmónico cuártico cuyo potencial tiene la forma [1]

$$V = x^2 + \lambda x^4 \ . \tag{10.1}$$

La identificación natural para el problema de perturbaciones es elegir $V_0 = x^2$ como el potencial no-perturbado, y $V_1 = x^4$ como la perturbación. La ecuación de Schrödinger correspondiente es

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + \lambda x^4 \right) \psi(x) = E\psi(x) \, .$$

Debido a la simetría del potencial (10.1) ante una transformación de paridad $x \to -x$, las eigenfunciones tienen una pa-

[1] Esta forma puede considerarse como una primera aproximación alrededor de un mínimo de un potencial anarmónico más general.

ridad definida, *i.e.*

$$\psi(-x) = \pm\psi(x) \ .$$

En particular, el estado base (que no tiene nodos) es una función *par*. El primer estado excitado tiene un solo nodo en $x = 0$ y es una función *impar*. Esta simetría es útil en la construcción de la solución.

10.1.1 Ecuación de Riccati-Bloch

Con la finalidad de que este capítulo sea autocontenido, vamos a repetir algunas ideas expuestas en capítulos anteriores. Comenzamos escribiendo la función de onda $\psi(x)$ en forma exponencial

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-\phi(x)} \ . \tag{10.2}$$

Al hacer esto se consigue una ecuación para la función fase $\phi(x)$:

$$\phi'^2 - \phi'' = V - E \ , \tag{10.3}$$

(véanse las ecuaciones (9.1)-(9.2)). En términos de la derivada logarítmica de la función de onda $y = \phi' = -(\log\psi)'$, la ecuación (10.3) se convierte en una ecuación diferencial (no-lineal) de Riccati-Bloch:

$$y'(x) - y^2(x) = E - V \ . \tag{10.4}$$

10.1.2 Teoría Perturbativa

La teoría perturbativa en potencias del parámetro λ para la ecuación de Riccati-Bloch se obtiene al substituir las expansiones

$$E \ = \ \sum_{n=0} \lambda^n E_n \ , \quad y \ = \ \sum_{n=0} \lambda^n y_n(x) \ , \tag{10.5}$$

en la ecuación (10.4). Juntando términos con la misma potencia de λ obtenemos las ecuaciones que definen las correcciones

perturbativas. La aproximación de orden cero, correspondiente al caso del oscilador armónico, esta definida por la relación

$$\left.\lambda^0\right| \qquad \begin{aligned} y_0{}' - y_0^2 &= E_0 - V_0 \\ &= E_0 - x^2 \,. \end{aligned} \tag{10.6}$$

En vez de usar las fórmulas generales (9.18), (9.19) para resolver esta ecuación, vamos a detenernos por un momento para analizar la ecuación de arriba. En el lado derecho de (10.6) tenemos un polinomio cuadrático $(E_0 - x^2)$ y es una función *par* en la variable x. Esto significa que el lado izquierdo $(y_0' - y_0^2)$ es un polinomio, y que y_0 debe ser una función *impar*. Por simple inspección podemos proponer como solución

$$y_0 \;=\; x \,.$$

Substituyendo en (10.6) se obtiene efectivamente la solución:

$$1 - x^2 \;=\; E_0 - x^2 \quad \Rightarrow \quad E_0 = 1 \,.$$

Por lo tanto $(y_0 = \phi_0')$

$$\phi_0 = -\frac{x^2}{2} \quad \Rightarrow \quad \psi_0 = e^{-\frac{x^2}{2}} \,. \tag{10.7}$$

De este modo la primera aproximación corresponde a la solución del estado base para el oscilador armónico, como debe ser.

Continuamos con la ecuación del orden uno en λ para la primera corrección:

$$\left.\lambda\right| \qquad y_1' - 2xy_1 \;=\; E_1 - x^4 \,. \tag{10.8}$$

Nuevamente, el lado derecho es un polinomio *par* en la variable x, pero ahora de cuarto grado. Entonces y_1 debe ser

un polinomio impar de tercer grado (en este caso y_1' sería un polinomio de segundo grado). Propongamos pues que

$$y_1 \;=\; \frac{\alpha}{3}x^3 + \beta x \qquad \Rightarrow$$

$$y_1' \;=\; \alpha x^2 + \beta \;,$$

entonces, sustituyendo en la ecuación para la primera corrección encontramos

$$\alpha x^2 + \beta - \frac{2}{3}\alpha x^4 - 2\beta x^2 \;=\; E_1 - x^4 \;,$$

y la solución es

$$\alpha \;=\; \frac{3}{2}\;, \quad 2\beta \;=\; \alpha \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{3}{4} \quad \Rightarrow \qquad E_1 = \beta \;,$$

es decir, la primera corrección a la energía y a la función $y(x)$ son:

$$E_1 \;=\; \frac{3}{4}\;, \tag{10.9}$$

$$y_1 \;=\; \frac{x^3}{2} + \frac{3}{4}x \;. \tag{10.10}$$

En los libros de texto usualmente aparece este cálculo, aunque de un modo más complicado.

> Como un punto interesante podemos aquí preguntarnos ¿qué nos dice la ecuación que determina la primera correción a la energía?

$$\langle x^4 \rangle = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-x^2} dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx} \;=\; \frac{3}{4} \;(=\; E_1) \;.$$

> Tal vez no es difícil calcular directamente la razón de estas dos integrales (funciones Γ) pero la idea es lo que importa: podemos calcular la razón de esas integrales de manera algebraica sin calcular cada integral de forma separada. Cada integral es un número transcedental pero la razón es un número racional!

Por otra parte, a partir de la definición $\phi_1' = y_1$, podemos determinar la primera corrección a la función *fase*

$$\phi_1 \;=\; \frac{x^4}{8} + \frac{3}{8}\,x^2 \;,$$

y a partir de la relación con la teoría perturbativa de Rayleigh-Schrödinger (véase la ecuación (8.9)) encontramos la siguiente identidad

$$\sum_{n\neq 0}^{\infty} \frac{V_1^{n0}}{E_0^{(0)} - E_0^{(n)}}\,\Psi_0^{(n)} \;=\; -\left(\frac{x^4}{8} + \frac{3}{8}x^2\right)\, c_0 e^{-\frac{x^2}{2}} \;, \qquad (10.11)$$

con c_0 la constante de normalización de la función Ψ_0. ¿Qué tenemos aquí?

Sabemos que las soluciones exactas del problema no-perturbado son

$$\Psi_n^{(0)} \;=\; c_n\, H_n(x)\, e^{-\frac{x^2}{2}} \;,$$

en donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite, y los coeficientes c_n son las constantes de normalización, cuyo valor es importante para la relación (10.11). Esta relación (10.11) nos dice que sólo dos términos en la suma son diferentes de cero (!), i.e. los términos que corresponden a los polinomios de Hermite $H_2(x)$ y $H_4(x)$ (de grados 2 y 4 respectivamente). Entonces, comparando ambos lados de la ecuación (10.11) encontramos

$$\left[\frac{V_1^{20}\, c_2 H_2(x)}{E_0^{(0)} - E_0^{(2)}} \;+ \frac{V_1^{40}\, c_4 H_4(x)}{E_0^{(0)} - E_0^{(4)}}\right] e^{-\frac{x^2}{2}} \;=\; -\left(\frac{x^4}{8} + \frac{3}{8}x^2\right)\, c_0\, e^{-\frac{x^2}{2}} \;, \qquad (10.12)$$

de donde se pueden determinar, en particular, los elementos de matriz V_1^{20} y V_1^{40} sin la necesidad de realizar integraciones.

Ahora veamos las correcciones de segundo orden. La ecuación que define esta corrección es

$$y_2{}' - 2y_0y_2 \;=\; E_2 + y_1^2 \;, \tag{10.13}$$

en donde ya se conocen y_0, y_1 de los pasos anteriores:

$$\begin{aligned} y_0 &= x \;, \\ y_1 &= \frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{4}x \;. \end{aligned}$$

Entonces, el lado derecho de (10.13) es un polinomio de grado 6, por lo que podemos suponer que y_2 es un polinomio impar de grado 5:

$$\begin{aligned} y_2 &= \alpha x^5 + \beta x^3 + \gamma x \,, \\ y_2{}' &= 5\alpha x^4 + 3\beta x^2 + \gamma \;. \end{aligned}$$

Sustituyendo y_0, y_1 y el Ansatz para y_2 en la ecuación (10.13) llegamos a

$$\begin{aligned} &5\alpha x^4 + 3\beta x^2 + \gamma - 2\alpha x^6 - 2\beta x^4 - 2\gamma x^2 \\ &= E_2 + \frac{x^2}{16}\left(2x^2+3\right)^2 \;=\; E_2 + \frac{9}{16}x^2 + \frac{3}{4}x^4 + \frac{1}{4}x^6 \;, \end{aligned}$$

de donde se obtiene:

- $$-2\alpha = 1/4 \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\frac{1}{8} \,,$$
- $$5\alpha - 2\beta = 3/4 \quad \Rightarrow \quad \beta = -\frac{11}{16} \,,$$

■

$$3\beta - 2\gamma = \frac{9}{16} \quad \Rightarrow \quad \gamma = -\frac{21}{16}\,,$$

c.f. ec. (6.20), y por lo tanto, la segunda corrección perturbativa de la energía es

$$E_2 \;=\; \gamma \;=\; -\frac{21}{16}\;, \tag{10.14}$$

y es negativa. Asimismo, la corrección y_2 es

$$-y_2 \;=\; \frac{1}{8}\,x^5 \;+\; \frac{11}{16}\,x^3 \;+\; \frac{21}{16}\,x\;. \tag{10.15}$$

Al igual que para el caso de E_1, para esta corrección tenemos una relación como la siguiente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{21}{16} + \frac{x^2}{16}\left(2x^2+3\right)^2 \right) e^{-\frac{x^2}{2}}\,dx \;=\; 0\,.$$

De manera general, podemos derivar la ecuación que define la n-ésima corrección

$$y_n{}' - 2xy_n \;=\; E_n - x^2\,P_n(x^2)\;, \tag{10.16}$$

en donde P_n es un polinomio de grado n en x^2. Podemos suponer entonces que la corrección y_n un polinomio impar de la forma

$$y_n \;=\; x\sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)}\,x^{2k}\;, \tag{10.17}$$

y calcular los coeficientes $a_k^{(n)}$ como incógnitas de forma algebraica. En particular, $a_0^{(n)} = E_n$. De hecho, es posible calcular explícitamente un número finito de coeficientes en frente de los términos de los grados mas altos: $a_n^{(n)}, a_{n-1}^{(n)} \ldots$. En particular,

$$a_n^{(n)} \;=\; -\frac{1}{2}\,\frac{(-1)^n\;\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\;\Gamma\left(n+1\right)}\;, \quad n = 0, 1, 2, \ldots\;, \tag{10.18}$$

en donde $a_0^{(0)} = 1$, y asintóticamente:

$$\lim_{n\to\infty} a_n^{(n)} = \frac{1}{2}\,\frac{(-1)^{n+1}}{\sqrt{\pi}\,n^{3/2}}\ . \tag{10.19}$$

La serie de coeficientes $a_n^{(n)}$ es convergente y la podemos sumar explícitamente

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n a_n^{(n)} x^{2n} = \sqrt{1+\lambda x^2} \equiv Y_0\ . \tag{10.20}$$

No es difícil reconocer que

$$xY_0 = \sqrt{V}\ ,$$

para el potencial V (10.1), y que éste tiene el sentido del momento clásico para una energía cero. Esto coincide con la corrección de orden cero en la teoría de perturbaciones para la ecuación generalizada de Bloch –ver más adelante la ec.(10.31).

El siguiente coeficiente tiene la forma

$$a_{n-1}^{(n)} = \frac{1}{2}\,\frac{(-1)^{n+1}\left(\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\,\Gamma\left(n+1\right)+\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\,\Gamma\left(n+1\right)}\ , \tag{10.21}$$

$n = 1, 2, \ldots$ y asintóticamente

$$\lim_{n\to\infty} a_{n-1}^{(n)} = \frac{1}{2}\,(-1)^{n+1}\ . \tag{10.22}$$

La serie de coeficientes $a_{n-1}^{(n)}$ es convergente y la podemos sumar explícitamente

$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n a_{n-1}^{(n)}\, x^{2(n-1)} = \frac{\lambda}{2\sqrt{1+\lambda\,x^2}}\left(\frac{1}{\sqrt{1+\lambda\,x^2}}+\frac{1}{1+\sqrt{1+\lambda\,x^2}}\right). \tag{10.23}$$

Esta coincide con la corrección de orden uno en la teoría de perturbaciones para la ecuación generalizada de Bloch –ver más adelante la ec.(10.33).

Podemos presentar las primeras nueve correcciones perturbativas de la energía en forma explícita:

$$E_0 = 1\,,\; E_1 = \frac{3}{4}\,,\; E_2 = -\frac{21}{16}\,,\; E_3 = \frac{333}{64}\,,\; E_4 = -\frac{30885}{1024}\,,\; E_5 = \frac{916731}{4096}\,,$$

$$E_6 = -\frac{65518401}{32768}\,,\; E_7 = \frac{2723294673}{131072}\,,\; E_8 = -\frac{1030495099053}{4194304}\,,$$

$$E_9 = \frac{54626982511455}{16777216}\,.$$

Enfatizamos aqui que todos estos números son racionales.

Si multiplicamos estos coeficientes por un factor adecuado reproducimos los coeficientes obtenidos por Bender y Wu, ($E_n^{\rm BW} = 2^{n-1}\,E_n$) en la referencia *Anharmonic Oscillator*, Carl M. Bender and Tai Tsun Wu, Phys. Rev. 184, 1231 (1969).

- Es notable que todos los coeficientes $a_k^{(n)}$ y E_n son números racionales y que los denominadores son potencias enteras de 2 (!).

- Es posible mostrar que el coeficiente $a_n^{(n)}$ (ec. (10.18)) no depende del estado que se estudie. Es universal.

- Es posible mostrar que el coeficiente $a_{n-1}^{(n)}$ depende linealmente del número cuántico k que identifica al estado k-ésimo excitado, $a_{n-2}^{(n)}$ depende cuadráticamente del número cuántico k, etc.

- El comportamiento asintótico (v. Bender and Wu, 1969) de las correcciones del estado base es

$$E_n \;\sim\; (-1)^{n+1}\left(\frac{6}{\pi^3}\right)^{1/2}\Gamma(n+\frac{1}{2})\,2\,\left(\frac{3}{2}\right)^n$$

- Aunque la serie perturbativa de la energía del estado base (y cualquier estado exitado) es finita en cada orden, la energía del estado base (y cualquier estado excitado) no es una función analítica de λ alrededor de $\lambda = 0$. Es una serie *asintótica*!

10.1.3 Ecuación generalizada de Bloch

Para el caso del oscilador anarmónico (10.1) podemos reescribir el potencial en la forma

$$V \;=\; x^2 + g^2 x^4 \;, \tag{10.24}$$

denotando $\lambda = g^2$, que es una forma particular de un potencial más general que tiene la forma

$$V \equiv \frac{1}{g^2}\hat{V}(g\,x) = x^2 + a_1\, g x^3 + a_2\, g^2 x^4 + \ldots + a_p\, g^p x^{2+p} + \ldots \;,$$

bajo la condición de que $V \geq 0$, lo que significa que V tiene un mínimo en $x = 0$. Entonces la ecuación de Riccati la podemos escribir en la forma de la ecuación de Riccati-Bloch (9.3)

$$y' - y^2 \;=\; E - \frac{1}{g^2}\hat{V}(g\,x) \;. \tag{10.25}$$

Siguiendo la descripción en el capítulo anterior, con un inocente cambio de variables

$$u \;=\; g\,x \;, \tag{10.26}$$

suponiendo $g > 0$ (constante de acoplamiento), llamando a u la variable clásica, y definiendo una nueva función desconocida

$$y(u) \;\equiv\; \frac{1}{g} z(u) \;, \tag{10.27}$$

se obtiene la *ecuación Generalizada de Bloch* para el oscilador anarmónico (10.24):

$$g^2 z'_u - z^2 \;=\; g^2 E - u^2 - u^4 \;. \tag{10.28}$$

Ahora, para resolver la ecuación (10.28) introducimos una expansión perturbativa en potencias de g^2 de la forma

$$z \;=\; \sum_{n=0} (g^2)^n \, z_n \;, \qquad E \;=\; \sum_{n=0} (g^2)^n \, E_n \;. \tag{10.29}$$

El término de orden cero es

$$(g^2)^0 \Big| \qquad -z_0^2 \;=\; -\hat{V}(u) \;. \tag{10.30}$$

de donde se obtiene que

$$z_0(u) \;=\; \sqrt{\hat{V}(u)} \;=\; u\sqrt{1+u^2} \;. \tag{10.31}$$

En términos de la función fase (ver el capítulo previo)

$$\phi_0(x) \sim \int y_0(x)\, dx \sim \int z_0(gx)\, dx \sim S_{\rm clas} \;,$$

en donde la acción clásica corresponde a una energía cero.

El siguiente término nos da la ecuación para la primera corrección

$$g^2 \Big| \qquad z'_0 - 2 z_0 z_1 \;=\; E_0 \;. \tag{10.32}$$

El término de orden cero para la energía corresponde a la energía del oscilador armónico. Para el estado base $E_0 = 1$. Entonces, podemos resolver la ecuación anterior para obtener la primera corrección a la función $z(u)$:

$$z_1(u) \;=\; \frac{z'_0 - 1}{2\, z_0} \;=\; \frac{1}{4} \left(\log \hat{V}(u)\right)' - \frac{1}{2\sqrt{\hat{V}(u)}} \;, \tag{10.33}$$

la cual es válida para cualquier perturbación del oscilador armónico. Este resultado es único, ya que automáticamente hemos obtenido una corrección logarítmica en la expansión de la fase de la función de onda

$$\phi \simeq S_{\rm clas} + \log \Delta + \dots$$

en donde el término logarítmico es de orden g^2.

10.1.4 Simetría de paridad en la ecuación de Riccati-Bloch

Volvamos a la ecuación de Riccati-Bloch (10.4) para el potencial anarmónico (10.1)

$$y'_x - y^2 = E - x^2 - g^2 x^4 \ , \quad \lambda = g^2 \ . \tag{10.34}$$

Como consecuencia del hecho de que el potencial es una función *par*, y por tanto la función de onda del estado base ψ_0 y de todos los estados excitados con números cuánticos *par*, son funciones pares, $\psi_0 = \psi_0(x^2)$ resulta que

$$y(-x) = -y(x) \, , \quad y = \frac{\psi'_0}{\psi_0} = \frac{\text{impar}}{\text{par}} \, ,$$

¿Qué significa esto? quiere decir que podemos escribir

$$y(x) = x \, \tilde{y}(x^2) = x \, \tilde{y}(\rho) \, , \quad \rho = x^2 \, .$$

Substituyendo esta expresión en la ecuación de Riccati-Bloch (10.34) obtenemos:

$$2\rho \tilde{y}'_\rho + \tilde{y} - \rho \tilde{y}^2 \ = \ E - \rho - g^2 \rho^2 \ , \tag{10.35}$$

en su forma final. El subíndice ρ denota que la derivada es con respecto de esa variable. Hasta nuestro conocimiento, esta es la primera vez que se escribe esta ecuación en la literatura. No

tenemos un criterio filosófico, pero por experiencia sabemos que esta ecuación es muy conveniente.

Ahora estamos listos para desarrollar una teoría perturbativa:

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} (g^2)^n E_n \ , \tag{10.36}$$

$$\tilde{y} = \sum_{n=0}^{\infty} (g^2)^n \tilde{y}_n \ . \tag{10.37}$$

Como siempre, comenzamos con el término de orden cero

$$(g^2)^0 \Big| \qquad 2\rho\tilde{y}_0' + \tilde{y}_0 - \rho\tilde{y}_0^2 = E_0 - \rho \, . \tag{10.38}$$

Esta ecuación no se ve fácil de resolver, pero sabemos cuál es la solución no-perturbada (oscilador armónico). La conjetura natural es

$$\tilde{y}_0 = 1 \, . \tag{10.39}$$

Substituyendo este Ansatz en la ecuación para la corrección de orden cero obtenemos

$$1 - \rho = E_0 - \rho$$

confirmando que el Ansatz (10.39) es la solución y que

$$E_0 = 1 \ .$$

Por supuesto, la conjetura es correcta cuando ya conocemos la respuesta.

El siguiente término en la teoría de perturbaciones viene a partir de la ecuación

$$(g^2)^1 \Big| \qquad 2\rho\tilde{y}_1' + \tilde{y}_1 - 2\rho\tilde{y}_0\tilde{y}_1 = E_1 - \rho^2 \ . \tag{10.40}$$

Ahora, el Ansatz para resolver la ecuación (10.40) es

$$\tilde{y}_1 = \alpha\,\rho + \beta\ .$$

Substituyendo este Ansatz obtenemos

$$2\rho\alpha + \alpha\rho + \beta - 2\alpha\rho^2 - 2\beta\rho \ = \ E_1 - \rho^2\ ,$$

de donde obtenemos, comparando potencias de ρ, la solución

$$\alpha = \frac{1}{2}\ , \tag{10.41}$$

$$3\alpha - 2\beta = 0\ ,$$

$$\beta = \frac{3}{4}\ . \tag{10.42}$$

Por lo tanto, $E_1 = \beta = 3/4$ como ya sabemos, y

$$\tilde{y}_1 \ = \ \frac{1}{2}\,\rho + \frac{3}{4}\ , \qquad E_1 \ = \ \frac{3}{4}\ .$$

10.1.5 Simetría de paridad en la Ecuación de Bloch Generalizada

La simetría de paridad del potencial (10.1) también tiene implicaciones para la ecuación generalizada de Bloch (10.28). En este caso

$$g^2 z'_u - z^2 = g^2 E - u^2 - u^4\ ,$$

en donde $u = g\,x\,,\ z = g\,y$, la función $z(u)$ es una función impar de la variable u:

$$z(-u) = -z(u)\ .$$

Entonces, usando el mismo truco que en la sección anterior, podemos escribir

$$z(u) = u\,\tilde{z}(u^2) \ = \ u\,\tilde{z}(r)\ , \qquad (r = u^2)\,.$$

Así, en términos de la variable r la ecuación generalizada de Bloch toma su forma final

$$2g^2 r\tilde{z}'(r) + g^2\tilde{z}(r) - r\tilde{z}^2(r) \;=\; g^2 E - r - r^2 \;.$$

De la misma forma, de la teoría perturbativa para la ecuación generalizada de Bloch, en términos de la función z obtenemos la ecuación de orden cero:

$$(g^2)^0 \Big| \qquad -r\tilde{z}_0^2 \;=\; r + r^2 \;. \tag{10.43}$$

Esta ecuación la resolvemos sin problema:

$$\tilde{z}_0 = (1+r)^{1/2} \,, \tag{10.44}$$

que podemos interpretar como un momento clásico, como ya hemos visto en secciones anteriores.

El término de primer orden es

$$(g^2) \Big| \qquad 2r\tilde{z}_0' + \tilde{z}_0 - 2r\tilde{z}_0\tilde{z}_1 \;=\; 1 \;, \quad (E_0 = 1) \;. \tag{10.45}$$

Una ecuación como esta fue el sueño de los clásicos: esta ecuación define el primer término en la expansión semiclásica. La solución a esta ecuación es

$$\tilde{z}_1 \;=\; \frac{2r\tilde{z}_0' + \tilde{z}_0 - 1}{2r\tilde{z}_0} \;=\; (\log\tilde{z}_0)' + \frac{1}{2r} - \frac{1}{2r\tilde{z}_0} \;.$$

En realidad, $\tilde{z}_1$ es la derivada del *determinante*, es el segundo término en la expansión semiclásica. Es muy diferente que aquella en el análisis estándar de WKB, $\sim \frac{1}{2}(\log p_E)'$, en donde p_E es momento clásico con energía E, ver el libro de Landau-Lifschitz, Quantum Mechanics, Capítulo VII.

10.2 Análisis asintótico de la ecuación de Schrödinger

El próximo paso en el análisis del problema del oscilador anarmónico es considerar los límites asintóticos en la variable x (o en $\rho = x^2$). Este análisis resulta más fácil con la ecuación de Riccati (10.35) que reproducimos aquí:

$$2\rho\tilde{y}'_\rho + \tilde{y} - \rho\tilde{y}^2 = E - \rho - g^2\rho^2 \, .$$

(a) El primer caso es el límite $\rho \to 0$. De la ecuación anterior obtenemos

$$\tilde{y} = E + A\rho + B\rho^2 + \ldots$$

¿Cuál es el siguiente término?

(b) El siguiente caso es el límite $\rho \to \infty$. Aquí la solución es

$$\tilde{y} = g\,\rho^{1/2} \; + \; \frac{1}{2g}\,\rho^{-1/2} \; + \; \ldots \; ,$$

que obtenemos a partir del momento clásico (10.44). Estos primeros dos coeficientes no contienen dependencia de la energía y son los mismos para cualquier estado excitado.

10.2.1 Interpolación

Con las expansiones asintóticas anteriores tenemos una guía para construir una interpolación que reproduzca ambos límites (cuando $x \to 0$ y cuando $x \to \pm\infty$). Una posible interpolación es

$$\psi_0 = \frac{1}{(1 + d\,g^2\,x^2)^{1/2}} \; e^{-\,\frac{a+bx^2+cg^2x^4}{(1+dg^2x^2)^{1/2}}} \quad . \tag{10.46}$$

Considerando a la función (10.46) como función variacional, podemos ver que el mínimo en la energía variacional corresponde al caso cuando

$$\frac{c^2}{d} \simeq g \; ,$$

con gran precisión. ¿Cuál es la razón? Esta condición, cuando se cumple la igualdad

$$\frac{c^2}{d} \;=\; g \;, \tag{10.47}$$

reproduce el comportamiento dominante exactamente cuando $x \to \infty$ pero no da una pérdida significativa en la precisión de la energía. Esta constricción (10.47) nos permite reducir el número de parámetros libres en la función (10.46).

Otra constricción:
Tomemos la fase en ψ_0:

$$\varphi \equiv -\frac{a + bx^2 + cg^2x^4}{(1 + dg^2x^2)^{1/2}}$$

y consideremos el límite $x^2 \to \infty$. Re-escribamos la fase en la forma

$$\varphi = \frac{cg^2x^4\left(1 + \frac{b}{cg^2x^2} + \frac{a}{cg^2x^4}\right)}{(dg^2x^2)^{1/2}\left(1 + \frac{1}{dg^2x^2}\right)^{1/2}} ,$$

y tomemos el límite. Simplificando obtenemos

$$\varphi \simeq \frac{cg|x|^3}{d^{1/2}}\left(1 + \left(\frac{b}{c} \;-\; \frac{1}{2d}\right)\;\frac{1}{g^2}\;\frac{1}{x^2} + \dots\right) .$$

Un cálculo variacional usando la función (10.46) como función de prueba (ver la Lección 11) indica que el factor enfrente del término $\propto \frac{1}{x^2}$, se comporta como $\simeq \frac{1}{2g^2}$ para cualquier valor de g! Esto significa que podemos imponer la constricción,

$$\frac{b}{c} \;-\; \frac{1}{2d} \;=\; \frac{1}{2} \;. \tag{10.48}$$

Esta constricción empeora muy poco los valores de la energía variacional!

Al final, imponiendo las dos constricciones (10.47), (10.48) sólo quedan dos parámetros variacionales en la función de prueba. Con esta función de prueba (10.46) podemos reproducir 10 dígitos significativos en la energía del estado base para todos valores de la constante de acoplamiento g. La corrección a la energía va como

$$\Delta E \equiv E_2 \sim 10^{-10} \ .$$

Esta precisión es comparable con la precisión que se ha logrado obtener con la QED (Electrodinámica Cuántica por sus siglas en inglés), pero en la QED la constante de acoplamiento (constante de estructura fina) tiene un valor muy pequeño $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{137}$.

Concluyendo, queremos enfatizar que la técnica de la Teoría de Perturbaciones presentada en esta Lección la podemos aplicar para un oscilador anarmónico más general de dos términos,

$$V \ = \ x^2 \ + \ \lambda x^{2k} \ = \ x^2(1 + \lambda x^{2k-2}) \equiv x^2 \tilde{V}, \ k > 2 \ ,$$

$\lambda = g^{2k-2}$, *con modificaciones mínimas.*

Introduciendo un potencial general par de grado $2k$

$$W(x) \ = \ a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 \ldots a_{2k} x^{2k} \ ,$$

y un potencial adicional par W_0 *de grado* $2k-2$

$$W_0(x) \ = \ b_0 + b_2 x^2 + \ldots b_{2k-2} x^{2k-2} \ ,$$

cuyos coeficientes $a_0, a_2, \ldots, a_{2k}$ *y* $b_0, b_2, \ldots, b_{2k-2}$ *vamos a considerar más tarde como parámetros variacionales, la fórmula de interpolación para la función de prueba del estado base tiene la forma*

$$\Psi_0 \ = \ \frac{1}{\sqrt{W_0}} \, e^{-\frac{W}{\sqrt{W_0}}} \ ,$$

que podemos comparar con (10.46). En un cálculo variacional esta fórmula da resultados de muy alta calidad para la energía del estado base.

LECCIÓN 11

El Método Variacional

11.1 Método Variacional

En esta sección vamos a estudiar el Método Variacional. Este método es el único método confiable para estudiar problemas un poco más complicados que los problemas triviales. Comenzamos definiendo la *funcional de energía* del sistema.

DEFINICIÓN: LA FUNCIONAL DE ENERGÍA

$$E[\Psi] \equiv \frac{\int \Psi^\star \mathcal{H} \Psi dx}{\int |\Psi|^2 dx}, \qquad \mathcal{H} = \text{ Hamiltoniano del sistema.}$$

Esta funcional tiene claramente dimensiones de energía para toda función Ψ normalizable. Existe un principio (Mini-max principle, ó Principio Variacional) que nos dice que la energía del estado base[1] de un sistema cuyo hamiltoniano es $\mathcal{H}$ co-

[1]Por el momento sólo hablaremos del estado de energía más baja

rresponde al mínimo

$$E \;=\; min_{\{\Psi\}} \frac{\int \Psi^* \mathcal{H} \Psi dx}{\int |\Psi|^2 dx} \; .$$

Se puede mostrar que la función Ψ que minimiza esta funcional satisface la ecuación de Schrödinger, pues es precisamente esta ecuación la que corresponde a las ecuaciones de Euler-Lagrange del problema variacional.

En la práctica al usar el principio variacional no podemos usar todas las funciones posibles del espacio de Hilbert. El procedimiento normal consiste en elegir una *función de prueba* $\Psi_{\text{trial}}(x, \{\alpha\})$, que dependa de algunos parámetros $\{\alpha\}$, para la cual por supuesto se tiene que

$$\Psi_{\text{trial}} \rightarrow E_{\text{trial}} \geq E_{\text{exacta}} \, , \qquad (E_{\text{trial}} = E[\Psi_{\text{trial}}]) \; .$$

Así pues la energía correspondiente a la función de prueba será una función que dependerá de los parámetros $\{\alpha\}$, y será, por lo tanto, una cota superior a la energía exacta del estado base

$$E_{\text{trial}}\,(\{\alpha\}) \quad \geq \quad E_{\text{exacta}} \; .$$

El problema se ha reducido entonces al un problema de *cálculo* para encontrar el mínimo de E_{trial} como función de los parámetros $\{\alpha\}$.

11.1.1 Selección de la función de prueba

El punto principal del método variacional es cómo elegir la función de prueba. Esta elección debe ser físicamente adecuada. De acuerdo con este criterio podemos elaborar el procedimiento de la siguiente manera:

(estado base).

1. Elegimos una función de prueba $\Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})$ que dependa de algunos parámetros $\{\alpha\}$. La función debe cumplir con las propiedades de simetría del problema que estudiamos.

2. Para cada función de prueba existe un *potencial de prueba* $V_{\rm trial}$ del cual $\Psi_{\rm trial}$ es una eigenfunción exacta. A partir de la ecuación de Schrödinger correspondiente podemos encontrar este potencial de prueba

$$\frac{\Psi_{\rm trial}{}''}{\Psi_{\rm trial}} \;=\; V_{\rm trial} - E_{\rm trial}\;. \tag{11.1}$$

Entonces $\mathcal{H}_{\rm trial} \;=\; -\partial_x^2 + V_{\rm trial} \;\Rightarrow$

$$\mathcal{H}_{\rm trial}\Psi_{\rm trial} \;=\; E_{\rm trial}\Psi_{\rm trial}\;,$$

por construcción.

3. Supongamos que $\Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})$ esta normalizada a la unidad y calculemos la energía variacional $E_{var}\,(\{\alpha\})$:

$$E_{var}\,(\{\alpha\}) \;=\; \int \Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\,\mathcal{H}\Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\,dx\;. \tag{11.2}$$

Sumando y restando $\mathcal{H}_{\rm trial}$ obtenemos

$$\begin{aligned} E_{var}\,(\{\alpha\}) \;&= \\ &= \int \Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\,[\mathcal{H} - \mathcal{H}_{\rm trial} + \mathcal{H}_{\rm trial}]\,\Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\;dx \\ &= E_{\rm trial} + \int \Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\,[V - V_{\rm trial}]\,\Psi_{\rm trial}\,(x,\{\alpha\})\,dx\,, \end{aligned}$$

en donde a la última integral le podemos dar el sentido de *primera corrección* perturbativa E_1, en donde el potencial no-perturbado corresponde a $V_0 \equiv V_{\rm trial}$ y el potencial *perturbativo* es $V_1 = V - V_{\rm trial}$. Así pues, podemos escribir

$$E_{var} \;=\; E_{\rm trial} + E_1\;. \tag{11.3}$$

Esta es la fórmula **central** de esta Lección: la energía variacional es suma de las dos primeras correcciones de la teoría de perturbaciones con respecto de la desviación del potencial original y el potencial de prueba!

Para ejemplificar el método regresemos al problema del oscilador armónico

$$V \;=\; x^2 \;,$$

y propongamos como función de prueba del estado base la función gaussiana

$$\Psi_{\rm trial} \;=\; e^{-\frac{\lambda x^2}{2}} \;, \tag{11.4}$$

entonces, el potencial asociado es

$$\frac{\Psi_{\rm trial}{}''}{\Psi_{\rm trial}} = V_{\rm trial} - E_{\rm trial} \;=\; \lambda^2\, x^2 - \lambda \;, \tag{11.5}$$

en donde $E_{\rm trial} = \lambda$, y usando el resultado para E_1 (ec. (8.20)) encontramos[2]

$$E_{var} \;=\; E_{\rm trial} + E_1 \;=\; \lambda + \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} \geq 1 \;, \quad \forall\, \lambda > 0 \;. \tag{11.6}$$

Minimizando E_{var} (ec. 11.6) con respecto del parámetro λ se obtiene

$$\frac{dE_{var}}{d\lambda} \;=\; \frac{1}{2} - \frac{1}{2\lambda^2} \stackrel{!}{=} 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda = \pm 1 \;,$$

y como la condición de normalizabilidad de $\Psi_{\rm trial}$ exige que $\lambda > 0$, obtenemos finalmente que

$$\lambda = 1 \qquad \Rightarrow$$
$$\Psi_{\rm trial}\,(\lambda = 1) = e^{-\frac{x^2}{2}} \;,$$
$$E_{var}\,(\lambda = 1) = 1 \;,$$

es la Solución Exacta!

[2]Recuérdese que la energía exacta es $E = 1$.

11.1.2 El oscilador anarmónico

Ahora ya sabemos lo suficiente como para atacar con el método variacional el problema no-trivial del oscilador anarmónico

$$V = x^2 \; + \; g^2\, x^4 \,, \tag{11.7}$$

en donde vamos a hacer la siguiente identificación:

$$\begin{aligned} V &= V_0 + V_1 \;, \\ V_0 &= \lambda^2 x^2 \;, \\ V_1 &= \left(1-\lambda^2\right) x^2 + g^2 x^4 \;. \end{aligned} \tag{11.8}$$

Consideramos la función de prueba

$$\Psi_{\rm trial} \;=\; \Psi_0 \;=\; e^{-\frac{\lambda x^2}{2}} \;,$$

con $E_{\rm trial} = E_0 = \lambda$, $y_0 = -(\ln \Psi_0)' = \lambda x$ (v. ecs. (8.14-8.17)). Vamos a usar nuestra Teoría Perturbativa para calcular las correcciones a la energía. Comenzamos con la primera corrección (ec. 8.20)

$$y_1{}' - 2y_0 y_1 \;=\; E_1 - V_1 \;.$$

Substituyendo y_0 y V_1 se obtiene

$$y_1' - 2\lambda x y_1 \;=\; E_1 - \left(1-\lambda^2\right) x^2 - g^2 x^4 \;.$$

Proponemos el siguiente *Ansatz* para y_1:

$$y_1 \;=\; ax + bx^3 \;.$$

Juntando términos y resolviendo para cada coeficiente enfrente de las potencias de x encontramos

$$a \;=\; \frac{2\,\lambda - 2\,\lambda^3 + 3\,g^2}{4\lambda^2} \;=\; \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} + \frac{3g^2}{4\lambda^2} \;, \tag{11.9}$$

$$b \;=\; \frac{g^2}{2\,\lambda} \;, \tag{11.10}$$

$$E_1 \;=\; a \;=\; \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} + \frac{3g^2}{4\lambda^2} \;. \tag{11.11}$$

Es importante remarcar que $a = E_1$ se cumple siempre (es una propiedad general) en $y_1 = ax + bx^3$.

Desde el punto de vista del principio variacional tenemos

$$E_{var} \;=\; \lambda + \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} + \frac{3g^2}{4\lambda^2} \;\geq\; E_{\text{exacta}}\;, \qquad \lambda > 0\;, \qquad \forall\; g^2\;, \tag{11.12}$$

y minimizando E_{var} con respecto del parámetro λ

$$(E_{var})'_\lambda \;=\; -\frac{1-\lambda^2}{2\lambda^2} - \frac{3g^2}{2\lambda^3} \stackrel{!}{=} 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\lambda\left(1-\lambda^2\right) + 3g^2 \stackrel{!}{=} 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\lambda^3 - \lambda - 3g^2 \stackrel{!}{=} 0\;. \tag{11.13}$$

Para encontrar el mínimo tenemos que resolver una ecuación cúbica [3](!).

Desde el punto de vista físico hay dos regímenes importantes:

1. $g^2 \to 0$ (acoplamiento débil, regresamos al problema del Oscilador Armónico). Proponemos una expansión en serie de potencias de la constante de acoplamiento g^2 para obtener una solución aproximada de la ecuación (11.13). A primer orden obtenemos:

$$\lambda \;=\; 1 + a\,g^2 + \ldots$$

$$g^2\Big| \qquad 2a - 3 \;=\; 0\;,$$

$$\Rightarrow \quad a \;=\; \frac{3}{2}\;.$$

[3]En vez de resolver la ecuación cúbica con las fórmulas de Cardano, aquí vamos a usar las aproximaciones que hemos desarrollado en los capítulos anteriores para las soluciones de la ecuación cúbica.

Con esta aproximación podemos estimar la energía del estado base

$$\lambda = 1 + \frac{3}{2}\, g^2 + \ldots \tag{11.14}$$

$$\begin{aligned} E_{var} &= \frac{1}{\left(1 + \frac{3}{2}\, g^2\right)^2} \left(1 + \frac{15}{4}\, g^2 + \frac{27}{8}\, g^4 + \frac{27}{16}\, g^6\right) \\ &\simeq (1 + \frac{3}{4} g^2 - \frac{9}{8} g^4 + \frac{27}{8} g^6 - \frac{243}{32} g^8 + \frac{243}{16} g^{10} + O\left(g^{12}\right)) \ . \end{aligned}$$

2. $g^2 \to \infty$ (acoplamiento fuerte). Para el comportamiento asintótico de la solución de la ecuación cúbica (11.13) proponemos una dependencia de la forma

$$\lambda \sim a\, g^{2\alpha} \ .$$

Substituyendo en la ecuación (11.13) se obtiene

$$\Rightarrow \quad a^3 g^{6\alpha} - a g^{2\alpha} - 3g^2 \ = \ 0 \ .$$

Aquí se tienen varias posibilidades. Supongamos que el primer y tercer términos se combinan y veamos si esta elección es consistente.

En este caso $\alpha = \frac{1}{3}$ y $a = 3^{\frac{1}{3}}$, y el segundo término es $\propto g^{\frac{1}{3}}$ que efectivamente es un término subdominante, con lo que tenemos

$$\lambda \ = \ (3g^2)^{\frac{1}{3}} \ + \ O\left(\frac{1}{g^{\frac{2}{3}}}\right) \ . \tag{11.15}$$

Sustituyendo esta aproximación en la ecuación para la energía variacional E_{var} (ec. 11.12) obtenemos

$$\begin{aligned} E_{var} &= \frac{3}{4}\,(3g^2)^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3g^2}\right)^{\frac{1}{3}} \ , \\ &\simeq 1{,}0816872\, g^{\frac{2}{3}} + \ldots \ . \end{aligned}$$

Este problema ha sido atacado miles de veces en artículos diferentes. El comportamiento exacto de la energía del estado base en el límite $g \to \infty$ es

$$\simeq \; e_0 \; g^{\frac{2}{3}} \; , \; e_0 \; = \; 1{,}0603260905 \ldots \; ,$$

en donde e_0 es energía del estado base en el potencial $V = x^4$. Con métodos numéricos contemporáneos podemos calcular e_0 con cualquier precisión, con cualquier número de dígitos que queramos.

Este análisis nos permite considerar el caso de $g > 0$ arbitrario. Tomando en cuenta los términos dominantes únicamente(!) en las fórmulas asintóticas (11.14) y (11.15) podemos hacer una interpolación muy simple [4]

$$\lambda \; = \; (1 + 3g^2)^{\frac{1}{3}} \; . \tag{11.16}$$

Substituyendo (11.16) en la expresión para la energía variacional (11.12) obtenemos

$$E_{var} \; = \; \frac{1}{4} \, \frac{9\, g^2 + 2 + 2\,(3\, g^2 + 1)^{\frac{1}{3}}}{(3\, g^2 \, + \, 1)^{\frac{2}{3}}} \; . \tag{11.17}$$

Esta expresión da una precisión $\lesssim 2\,\%$ en la energía de estado base para cualquier valor de la constante de acoplamiento $g^2 \in [0, \infty)$. Por ejemplo, para $g^2 = 1$, la expresión (11.17) nos da una energía $E_{var} \; = 1.406318486$ en comparación con el resultado exacto $E \; = \; 1.392351641563 \ldots$ (ver por ejemplo, *Int. Jour. Mod. Phys.* **A 35** (2020) 2050005, J. C. del Valle and A. V. Turbiner) lo cual representa una diferencia de $\sim 1\,\%$.

[4] La solución real exacta de la ecuación (11.13), es $\lambda = \frac{1}{6} \, \frac{\left(324\, g^2 + 12 \sqrt{729\, g^4 - 12}\right)^{2/3} + 12}{(324\, g^2 + 12 \sqrt{729\, g^4 - 12})^{1/3}}$ con la cual se obtiene $E_{var} \; = \; 1{,}403323286$.

LECCIÓN 12

Conclusiones: Fin del Curso

En general, este curso ha durado entre 12 a 15 semanas. Todas las herramientas necesarias para tratar cualquier ecuación de Schrödinger unidimensional sin dependencia de tiempo ya han sido presentadas.

Es necesario mencionar que en relación con descripción de las curvas de potencial de las moléculas diatómicas, recientemente apareció una nueva clase de potenciales unidimensionales - los potenciales racionales que tienen la forma de una razón dos polinomios. En particular, para las moléculas diatómicas hetero-nucleares con cargas Z_A, Z_B estos potenciales tienen la forma

$$V_{ion}(R) \;=\; \frac{Z_A Z_B}{R}\;\frac{P_N(R)}{Q_{N+3}(R)}$$

en el de una molécula cargada y

$$V_{neutral}(R) \;=\; \frac{Z_A Z_B}{R}\;\frac{P_N(R)}{Q_{N+5}(R)}$$

en el caso de una molécula neutra. Aquí P, Q son polinomios de la variable R (la distancia entre los núcleos) y N es un número entero.

El estudio de estos potenciales es una nueva meta de este curso en futuro.

La generalización de los resultados presentados a el caso de potenciales multidimensionales es un problema no-trivial, grande y no bien desarrollado. Aun en el caso plano - la dinámica cuántica en dos variables - hay muchos problemas que no tienen soluciones concretas. El Método Variacional es el método más usado para tratar problemas multidimensionales.

Agradecimientos

La primera versión de estas notas se produjo como resultado de un curso privado de conferencias de 30 días en 2001 impartido por uno de los autores (AVT) al Prof. M A Shubin (Northeastern University, Boston, MA) en M.F.O., Oberwolfach, Alemania (programa RiP). AVT agradece a M.F.O., Oberwolfach por su amable invitación.

Los autores quieren agradecer especialmente, de manera póstuma, al Prof. Nikolai Vasilevski (profesor emérito del CINVESTAV, Ciudad de México) quien realizó valiosas sugerencias y correciones especialmente al capítulo 2 de este libro. El Prof. Vasilevski tristemente dejó de existir el pasado 26 de febrero de 2024.

Este trabajo cuenta con el apoyo parcial de los proyectos PAPIIT IN113819 y IN113022 de la DGAPA-UNAM y del proyecto A1-S-17364 del CONACyT (México).

APÉNDICE A

Funciones Especiales

A.1 Función *Gamma*

La función Gamma $\Gamma(x)$ esta definida como sigue:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \quad , \quad \text{Re} \quad x > 0$$

lo cual puede expresarse también de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = x e^{\gamma x} \prod_{n=1}^{\infty} \left[1 + \frac{x}{n}\right] e^{\frac{-x}{n}}$$

donde

$$\gamma = \lim_{m \to \infty} \left(\sum_{n=1}^{m} \frac{1}{n} - \ln(m) \right) = 0{,}577...$$

es conocida como *constante de Euler*.

Fórmula de Stirling $(x \to \infty)$

$$\Gamma(x) = x^{x-1/2} e^{-x} \sqrt{2\pi} (1 + \frac{1}{12\,x} + \mathcal{O}(\frac{1}{x^2})) \qquad \text{(A.1)}$$

Propiedades

$$\Gamma\left(x+1\right)=x\Gamma(x)$$

la anterior es una ecuación funcional, en donde $\Gamma(x)$ es la única solución para esta ecuación[1]

$$\Gamma(x)\Gamma\left(1-x\right)=\frac{\pi}{\sin\left(\pi x\right)}\Rightarrow$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}+x\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-x\right)=\frac{\pi}{\cos\left(\pi x\right)}$$

De esta forma tenemos que:

$$\Gamma\left(1\right)=1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\pi^{\frac{1}{2}}$$

$$\Gamma\left(n\right)=(n-1)!$$

También es importante dar una representación de la función Gamma en la forma:

$$\Gamma\left(z\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n}}{n!\left(z+n\right)}+Q\left(z\right)\,,$$

con $Q\left(z\right)$ una función entera.

Γ tiene polos simples cuando;

$$z=0,-1,-2,\ldots,$$

con residuos

$$R_{n}=\frac{(-1)^{n}}{n!}\,.$$

[1]La Teoría de ecuaciones funciónales muy difícil y poco desarrollada.

Fórmula del argumento doble (Fórmula de Legendre):

$$\Gamma\left(2x\right) = 2^{2x-1}\pi^{-\frac{1}{2}}\Gamma(x)\Gamma\left(x+\frac{1}{2}\right) .$$

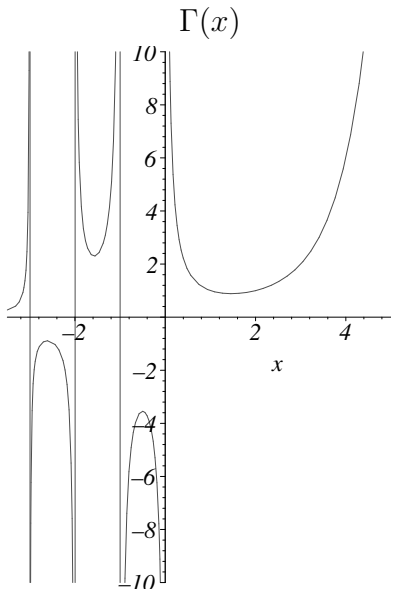


Figura A.1: Gráfica de la función $\Gamma(x)$.

A.2 Función *Beta*

$$B\left(x,y\right) = \int_0^1 t^{x-1}\left(1-t\right)^{y-1} dt\,, \qquad \begin{array}{ll} \text{Re} & x>0 \\ \text{Re} & y>0 \end{array}$$

- simetría: $B(x,y) = B(y,x)$.

• En términos de la función Gamma, la función Beta se pude representar de la siguiente forma:

$$B\left(x,y\right)=\frac{\Gamma(x)\Gamma\left(y\right)}{\Gamma\left(x+y\right)}$$

Además existen ecuaciones funcionales para describir a la función Beta, de tal forma que se tiene:

$$B\left(x,y+1\right)=\frac{y}{x}B\left(x+1,y\right)=\frac{y}{x+y}B\left(x,y\right)$$

Ramanujan (famoso matemático hindú Srinivasa Ramanujan (1887-1920)): una de sus proposiciones demostradas usando la función *Beta* es:

$$\int_0^\infty \frac{\cos\left(2xt\right)}{\cosh\left(\pi t\right)}dt=\frac{1}{2\cosh(x)}$$

A.3 Función *Psi*

Función *Psi*

$$\psi\left(z\right)=\frac{\Gamma'\left(z\right)}{\Gamma\left(z\right)}$$

$\psi(z)$ es la derivada logarítmica de la función Gamma.

Propiedades:

$$\psi\left(1\right)=-\gamma=-\int_0^\infty e^{-t}ln\left(t\right)dt\,,$$

$$\psi(z+1)=\psi(z)+\frac{1}{z}\,,$$

Representación integral:

$$\psi\left(z\right)=-\gamma+\int_0^1\frac{1-t^{z-1}}{1-t}dt$$

APÉNDICE B

El Oscilador Armónico

La ecuación de Schroedinger para el oscilador armónico unidimensional en unidades atómicas ($\hbar = m = 1$) y con $\omega = 1$ es[1]:

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)\,, \quad x \in (-\infty, +\infty)\,, \tag{B.1}$$

en donde $n = 0, 1, 2, \ldots$ es un nńumero cuántico que etiqueta los estados ligados discretos del sistema. Convenientemente podemos simplificar la ecuación (B.1) a la forma

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right]\psi_n(x) = \epsilon_n\psi_n(x)\,, \quad \text{con} \quad \epsilon_n = 2\,E_n\,. \tag{B.2}$$

[1] $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x), \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2)\,,$
$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n\,n!}}\cdot\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$
.

Proposición: La función de onda del estado base[2] es

$$\psi_0 = \mathcal{N} e^{-x^2/2}\,, \tag{B.3}$$

en donde $\mathcal{N}$ es una constante de normalización.

Demostración: Efectivamente, si calculamos

$$\frac{d}{dx}\psi_0 = \mathcal{N}(-x)e^{-x^2/2} = -x\,\psi_0\,; \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi_0 = (x^2-1)\psi_0\,,$$

y substituimos en la ecuación de Schroedinger, tenemos

$$-\frac{1}{2}(\cancel{x^2}-1)\psi_0 + \frac{1}{2}\cancel{x^2}\psi_0 = E_0\psi_0\,,$$

Entonces, la función (B.3) es solución del oscilador armónico con energía

$$E_0 = \frac{1}{2}\,, \quad \text{ó} \quad \epsilon_0 = 1\,.$$

El problema del oscilador armónico posee la propiedad de factorización, *i.e.* todas las eigenfunciones tienen la forma

$$\psi_n(x) = \psi_0(x)\,\phi_n(x)\,, \tag{B.4}$$

en donde $\psi_0(x)$ es la función de onda del estado base. Para obtener la ecuación que satisface la función $\phi_n(x)$ hacemos lo siguiente: comenzamos con la ecuación de eigenvalores $H\psi_n = E_n\psi_n$ y usamos la forma $\psi_n(x) = \psi_0(x)\,\phi_n(x)$:

$$H\psi_0\phi_n = E_n\psi_0\phi_n\,,$$

ahora, multiplicamos por la izquierda por ψ_0^{-1} para obtener

$$\left(\psi_0^{-1}H\psi_0\right)\phi_n = E_n\phi_n\,, \tag{B.5}$$

de donde vemos inmediatamente que la función $\phi_n(x)$ es una eigenfunción del Hamiltoniano transformado $h \equiv \psi_0^{-1}H\psi_0$.

[2]Esta es una función sin nodos (Teorema de Perron)

Vamos a encontrar explícitamente la forma de este operador transformado:

$$h = \psi_0^{-1}\Big[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\Big]\psi_0\,.$$

Es conveniente expresar el estado base en la forma

$$\psi_0 = e^{-\varphi_0(x)}\,, \tag{B.6}$$

en donde $\varphi_0(x) = x^2/2$. Ahora, vamos a probar primero que el operador derivada se transforma como:

$$e^{\varphi_0(x)}\frac{d}{dx}e^{-\varphi_0(x)} = \frac{d}{dx} - \varphi_0{}'\,.$$

Efectivamente,

$$\begin{aligned} e^{\varphi_0(x)}\frac{d}{dx}e^{-\varphi_0(x)}\,\phi(x) &= e^{\varphi_0(x)}\left\{e^{-\varphi_0(x)}\phi'(x) - \varphi_0' e^{-\varphi_0(x)}\phi(x)\right\} \\ &= \phi'(x) - \varphi_0'\,\phi(x)\,. \end{aligned}$$

Similarmente, usando un truco simple[3] obtenemos

$$\begin{aligned} e^{\varphi_0(x)}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\varphi_0(x)}\,\phi(x) &= e^{\varphi_0(x)}\frac{d}{dx}e^{-\varphi_0(x)}e^{\varphi_0(x)}\frac{d}{dx}e^{-\varphi_0(x)}\,\phi(x) \\ &= \left(e^{\varphi_0(x)}\frac{d}{dx}e^{-\varphi_0(x)}\right)^2\phi(x) \\ &= \left(\frac{d}{dx} - \varphi_0{}'\right)^2\phi(x) \\ &= \left(\frac{d^2}{dx^2} - 2\varphi_0'\frac{d}{dx} - \varphi_0'' + (\varphi_0')^2\right)\phi(x)\,. \end{aligned}$$

Ahora, usando la forma explícita $\varphi_0 = x^2/2$, obtenemos

$$h = -\frac{1}{2}\Big(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} - 1 + (x)^2\Big) + \frac{1}{2}x^2\,.$$

[3]Insertando entre las derivadas el factor $e^{-\varphi_0(x)}e^{\varphi_0(x)} = 1$

Entonces, la ecuación de eigenvalores $h\phi_n = E_n\phi_n$ se puede escribir como:

$$\Big(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} - 1 + 2E_n\Big)\phi_n = 0\,, \tag{B.7}$$

que es la ecuación de Hermite[4] con $2n = -1 + 2E_n$, y por lo tanto las soluciones son los polinomios de Hermite $\phi_n(x) = H_n(x)$. Finalmente podemos expresar las soluciones del oscilador armónico como[5]

$$\psi_n(x) = H_n(x)e^{-x^2/2}\,,$$

con

$$E_n = n + \frac{1}{2} \quad n = 0, 1, 2 \ldots\,.$$

i.e. el espectro es equidistante con espaciamiento $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = 1$.

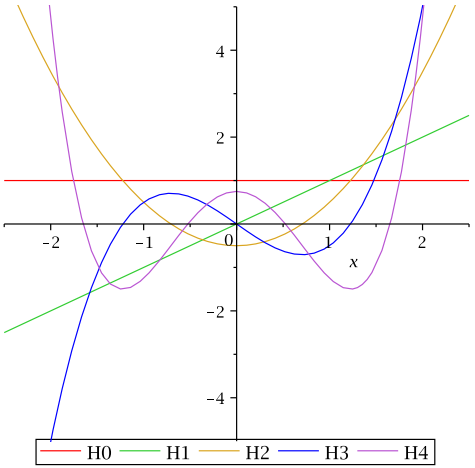
Tabla B.1: Primeros polinomios de Hermite ortonormalizados según $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x)H_m(x)dx = \sqrt{\pi}\,2^n\,n!\,\delta_{n,m}$. Los polinomios de Hermite $H_n(x)$ son solución de la ecuación diferencial $u'' - 2xu' = -2\lambda u$, con $\lambda = n$.

n	$H_n(x)$	ceros	
0	1	–	–
1	$2x$	0	0
2	$4x^2 - 2$	$\pm\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\pm$0,7071067812
3	$8x^3 - 12x$	$0, \pm\frac{\sqrt{6}}{2}$	$0, \pm$1,224744871
4	$16x^4 - 48x^2 + 12$	$\pm\frac{1}{2}\sqrt{6 \pm 2\sqrt{6}}$	$\pm$1,650680124, $\pm$0,524647623

[4]La ecuación de Hermite aparece como $\Big(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2\,n\Big)H_n(x) = 0\,.$

[5]Escrita así la solución no esta normalizada a la unidad.

Figura B.1: Primeros polinomios de Hermite escalados por un factor $1/2^n$.



Simetría $x \to -x$

La ecuación de Schroedinger (B.1) para el problema del oscilador armónico tiene una simetría evidente: el problema es invariante ante transformaciones de paridad $P : x \to -x$, *i.e.* $[H, P] = 0$, en donde P es el operador de paridad. En este caso, sabemos que las eigenfunciones tienen una paridad definida. Podemos suponer que las eigenfunciones pueden escribirse como una de las dos formas siguientes:

$$\psi(x) = \begin{cases} f(x^2) & \text{funciones pares,} \\ x\, g(x^2) & \text{funciones impares.} \end{cases}$$

Estas formas sugieren el cambio de variables

$$x^2 \to t\,, \quad t \in (0, \infty)\,.$$

Llevando a cabo este cambio de variable en la función de onda del estado base (B.3) obtenemos

$$\psi_0 = \mathcal{N}\, e^{-t/2}\,,$$

con la cual la transformación (B.5) conduce a la ecuación de Hermite (B.7) para las soluciones pares. En términos de la variable t esta ecuación toma la forma

$$\left(4t\frac{d^2}{dt^2} - 4(t-1/2)\frac{d}{dt} + 2n\right)\phi_n(t) = 0\,, \quad n = 2k, k = 0, 1\ldots \tag{B.8}$$

Dividiendo por 4 se obtiene la ecuación diferencial de los polinomios generalizados de Laguerre[6] para $\alpha = -1/2, n = k$:

$$\left(t\frac{d^2}{dt^2} + \left(\frac{1}{2} - t\right)\frac{d}{dt} + k\right)\phi_{2k}(t) = 0\,, \quad k = 0, 1\ldots \tag{B.9}$$

La relación entre los polinomios de Hermite de grado par y los polinomios generalizados de Laguerre es:

$$H_{2n}(x) = (-1)^n\ 2^{2n}\ n!\ L_n^{(-1/2)}(x^2)\,,$$

y para los polinomios impares:

$$H_{2n+1}(x) = (-1)^n\ 2^{2n+1}\ n!\ x\ L_n^{(1/2)}(x^2)\,.$$

[6]La ecuación diferencial de Laguerre

$$x\,y'' + (\alpha + 1 - x)\,y' + n\,y = 0$$

tiene soluciones polinomiales llamados Polinomios de Laguerre generalizados o polinomios de Laguerre asociados. La fórmula de Rodriguez para estos polinomios es

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^{n+\alpha}\right).$$

Los polinomios de Laguerre se obtienen de los polinomios generalizados para el caso $\alpha = 0$:

$$L_n^{(0)}(x) = L_n(x).$$

Operadores de Creación y Aniquilación

En esta sección vamos a resolver la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico mediante el método de operadores de *creación* y *aniquilación* introducidos por P.A.M. Dirac.

Consideremos el operador Hamiltoniano del oscilador armónico en la forma:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 \,.$$

Podemos factorizar este operador diferencial de segundo orden como un producto de dos operadores diferenciales de primer orden (hasta una constante) como[7]

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dx}+x\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx}+x\right)+\frac{1}{2}\left[\frac{d}{dx},x\right] \,.$$

Definamos los operadores de creación y aniquilación:[8]

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{d}{dx}\right) \qquad \text{Operador de creación}\,,$$

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+\frac{d}{dx}\right) \qquad \text{Operador de aniquilación}\,.$$

En términos de estos operadores podemos escribir el operador Hamiltoniano como

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}\,.$$

De la definición de estos operadores, y usando la relación de cuantización canónica $\left[\frac{d}{dx},x\right]=1$, obtenemos la relaciones de conmutación

$$\begin{aligned}\left[a,a^\dagger\right] &= 1\,,\\ \left[H,a^\dagger\right] &= \ a^\dagger\,,\\ [\,H,\,a\,] &= -a\,.\end{aligned}$$

[7] En donde $\left[\frac{d}{dx},x\right]=1$.

[8] Es fácil probar que el operador $a^\dagger$ es el operador adjunto de a.

La forma de estas relaciones de conmutación implica lo siguiente:

Si ψ_n es un eigenestado de H con eigenvalor E_n, *i.e.*

$$H\psi_n = E_n\psi_n\,,$$

entonces

- $a^\dagger\psi_n$ es un eigenestado de H con eigenvalor $E_n + 1$,
- $a\psi_n$ es un eigenestado de H con eigenvalor $E_n - 1$,

y son estas propiedades las que le dan su nombre a los operadores $a^\dagger, a$ como operadores de creación y aniquilación respectivamente.

Demostración:

Consideremos $Ha^\dagger\psi_n$ y usemos la relación $\left[H, a^\dagger\right] = a^\dagger$ para invertir el orden de los operadores $Ha^\dagger = a^\dagger H + a^\dagger$ con el fin de tener al operador H enfrente de ψ_n. Entonces,

$$Ha^\dagger\psi_n = \left(a^\dagger H + a^\dagger\right)\psi_n = (E_n + 1)\,a^\dagger\psi_n\,.$$

De la misma manera consideramos $\hat{H}a\psi_n$ y usamos la relación $[H, a] = -a$ para obtener

$$Ha\psi_n = (aH - a)\,\psi_n = (E_n - 1)\,a\psi_n\,,$$

q.e.d.

Ahora bien, si el operador H es un operador acotado, es decir, si existe un eigenestado ψ_0 de mínima energía E_0 entonces se debe cumplir que

$$a\,\psi_0 = 0\,. \tag{B.10}$$

En este caso se tiene que

$$H\psi_0 = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = \frac{1}{2}\psi_0\,,$$

i.e.

$$E_0 = \frac{1}{2}\,.$$

Para obtener explícitamente la forma de ψ_0 debemos resolver la ecuación diferencial de primer orden (B.10). Usando la representación diferencial del operador de aniquilación:

$$a\,\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0 = 0\,,$$

de donde se obtiene que $\frac{d}{dx}\psi_0 = -x\psi_0$ y por tanto

$$\frac{d}{dx}\log\psi_0 = \frac{\psi_0'}{\psi_0} = -x\,,$$

que podemos integrar fácilmente para obtener

$$\psi_0 = \mathcal{N}e^{-x^2/2}\,, \tag{B.11}$$

en donde $\mathcal{N}$ incluye la constante de integración arbitraria, que se determina por la condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} {\psi_0}^2 dx = 1 \;\Rightarrow \mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\,.$$

Estados excitados

Los eigenestados excitados del oscilador armónico se pueden obtener por aplicación recursiva del operador de creación sobre el estado base ψ_0:

$$\psi_n \propto \left(a^\dagger\right)^n \psi_0\,, \tag{B.12}$$

con energía

$$E_n = n + \frac{1}{2}\,. \tag{B.13}$$

Entonces, omitiendo el factor de normalización de ψ_0, obtenemos los estados excitados como:

$$\psi_n \propto \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}\,.$$

Calculemos primero

$$\begin{aligned}
n=0 \quad & \left(x - \frac{d}{dx}\right)^0 e^{-x^2/2} = e^{-x^2/2}\,,\\
n=1 \quad & \left(x - \frac{d}{dx}\right)^1 e^{-x^2/2} = 2x\, e^{-x^2/2}\,,\\
n=2 \quad & \left(x - \frac{d}{dx}\right)^2 e^{-x^2/2} = 2(2x^2-1)\, e^{-x^2/2}\,,\\
n=3 \quad & \left(x - \frac{d}{dx}\right)^3 e^{-x^2/2} = 4x(2x^2-3)\, e^{-x^2/2}\,,\\
n=4 \quad & \left(x - \frac{d}{dx}\right)^4 e^{-x^2/2} = 4(4x^4-12x^2+3)\, e^{-x^2/2}\,,\\
& \ldots
\end{aligned}$$

Todas estas funciones son el producto de un polinomio multiplicando a la función de onda del estado base. Estos polinomios son los polinomios de Hermite definidos mediante la relación

$$H_n(x) = e^{x^2/2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}\,.$$

Los primeros polinomios de Hermite se muestran en la Tabla B.1.

Hemos obtenido entonces que

$$\psi_n(x) \propto \left(a^\dagger\right)^n \psi_0(x) \propto H_n(x)\, e^{-x^2/2}\,.$$

Si usamos la normalización indicada en la Tabla B.1 para los polinomios de Hermite, entonces es fácil obtener las eigenfunciones *normalizadas* del oscilador armónico:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n\, n!}} H_n(x)\, e^{-x^2/2}\,, \quad n = 0, 1, 2 \ldots \qquad \text{(B.14)}$$

con

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x)\psi_n(x)\,dx = \delta_{n,m}\,.$$

Estas eigenfunciones forman un conjunto ortonormal completo (base) en el espacio de Hilbert $L_2(\mathbb{R})$ de funciones de cuadrado integrable definidas en la recta $x \in (-\infty, +\infty)$.

De la discusión anterior, encontramos las eigenfunciones del oscilador armónico

$$\psi_n(x) = (1/\sqrt{n!})\left(a^\dagger\right)^n \psi_0(x)\,,$$

debidamente normalizadas, y que

$$a\psi_n(x) = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}\,,$$

$$a^\dagger\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\,.$$

APÉNDICE C

Soluciones a los Problemas

Demuestre la siguiente desigualdad del triángulo (desigualdad de Cauchy-Buniakovski):

$$\|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\|\,, \tag{C.1}$$

Solución:

Elevando al cuadrado y expandiendo ambos lados de (C.1) notamos que probar tal desigualdad se reduce a demostrar que $\|\psi\|\,\|\varphi\| \geq \|(\psi\,,\varphi)\|$. Consideremos entonces el cuadrado de la norma del vector $\chi = \psi + \lambda\varphi$ como función del parámetro real λ,

$$\|\chi\|^2 = (\chi,\chi) = (\psi\,,\psi) + \lambda^2(\varphi,\,\varphi) + 2\lambda(\psi,\,\varphi) \geq 0\,, \tag{C.2}$$

$\|\chi\|^2$ posee un mínimo $\lambda_{min} = -\frac{(\psi,\varphi)}{(\varphi,\varphi)}$. Evaluando (C.2) en $\lambda = \lambda_{min}$ se obtiene que

$$\|\psi\|^2\,\|\varphi\|^2 \geq \|(\psi,\,\varphi)\|^2\,, \tag{C.3}$$

que es lo que queríamos demostrar. La demostración es similar para el caso de un campo vectorial complejo.

Determinar la tercera función φ_3, tal que $(\varphi_3,\, \varphi_1) = (\varphi_3,\, \varphi_2) = 0$ y $(\varphi_3,\, \varphi_3) = 1$.

Solución:

Proponemos el Ansatz $\tilde{\varphi}_3 = f_3 - a\varphi_1 - b\varphi_2$, donde a, b son escalares por determinar. Escribiendo explícitamente $(\varphi_1,\, \tilde{\varphi}_3)$ tenemos que

$$\begin{aligned}(\varphi_1,\, \tilde{\varphi}_3) &= (\varphi_1,\, f_3) - a(\varphi_1,\, \varphi_1) - b(\varphi_1,\, \varphi_2) \\ &= (\varphi_1,\, f_3) - a \\ &= 0\,,\end{aligned} \tag{C.4}$$

donde hemos utilizado el hecho de que las 2 funciones anteriores φ_1, φ_2 son ortonormales entre sí, por lo tanto $a = (\varphi_1,\, f_3)$ y análogamente $b = (\varphi_2,\, f_3)$.

Es importante enfatizar que los coeficientes a, b no son otra cosa sino las proyecciones (del vector φ_3) a lo largo de los vectores que ellos multiplican. Al normalizar el vector $\tilde{\varphi}_3$ obtenemos φ_3,

$$\varphi_3 = \frac{f_3 - (\varphi_1,\, f_3)\varphi_1 - (\varphi_2,\, f_3)\varphi_2}{\|f_3 - (\varphi_1,\, f_3)\varphi_1 - (\varphi_2,\, f_3)\varphi_2\|}\,, \tag{C.5}$$

¿Cuál es la forma general de la n-ésima función de Gram-Schmidt $\phi_n(x)$, con $f_n(x) = x^n$, $W(x) = 1$, y $G = [-1, +1]$?

Hint: El dominio G sugiere que se usen funciones trigonométricas.

Solución:

Podemos hacer un cambio de variables trigonométrico

$$x = \cos(y)\,,$$

con lo cual el sistema de funciones se transforma en

$$1, \cos(y),\, \cos^2(y),\, \ldots, \cos^n(y), \ldots$$

y el producto escalar en

$$(\phi_n(y), \phi_m(y)) = \int_0^\pi \phi_n(y)\phi_m(y)\, \sin(y) dy\,.$$

En la solución encontraremos integrales de la forma

$$\int_0^\pi \cos^n(y) \sin(y)\, dy = \begin{cases} \dfrac{2}{n+1} & n = 0, 2, 4, \ldots\,, \\ 0 & n = 1, 3, 5, \ldots\,. \end{cases}$$

Una vez mas, la primera función se elige como

$$\phi_0(y) = \frac{f_0}{||f_0||} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,, \qquad ||f_0||^2 = \int_0^\pi (1)^2\, \sin(y) dy = 2\,.$$

La segunda función es

$$\phi_1(y) = \frac{\tilde{\phi}_1}{||\tilde{\phi}_1||}\,, \text{donde } \tilde{\phi}_1(y) = \cos(y) - (\cos(y), \phi_0(y))\, \phi_0(y)\,,$$

pero el segundo término es cero:

$$(\cos(y), \phi_0(y)) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\pi \cos(y) \sin(y)\, dy = 0\,,$$

por lo tanto

$$\tilde{\phi}_1(y) = \cos(y)\,, \quad ||\tilde{\phi}_1||^2 = \int_0^\pi \cos(y)^2 \sin(y)\, dy = \frac{2}{3}\,,$$

$$\phi_1(y) = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos(y)\,.$$

La tercera función es

$$\phi_2(y) = \frac{\tilde{\phi}_2}{||\tilde{\phi}_2||}\,,$$

en donde

$$\tilde{\phi}_2(y) = \cos^2(y) - (\cos(y)^2, \phi_1(y))\,\phi_1(y) - (\cos(y)^2, \phi_0(y))\,\phi_0(y)\,,$$

$$(\cos(y)^2, \phi_1(y)) = \sqrt{\frac{3}{2}} \int_0^\pi \cos(y)^3 \sin(y)\, dy = 0$$

$$\begin{aligned}(\cos(y)^2, \phi_0(y))\,\phi_0(y) &= \frac{1}{2}\int_0^\pi \cos(y)^2 \sin(y)\, dy \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{3}\,.\end{aligned}$$

Entonces

$$\tilde{\phi}_2(y) = \cos^2(y) - \frac{1}{3}\,.$$

y el cuadrado de su norma es

$$\begin{aligned}||\tilde{\phi}_2(y)||^2 &= \int_0^\pi \left(\cos(y)^2 - \frac{1}{3}\right)^2 \sin(y)\, dy \\ &= \left(\frac{2}{5}\right) - \frac{2}{3}\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{1}{9}\left(\frac{2}{1}\right) = \frac{8}{45}\,,\end{aligned}$$

y finalmente

$$\phi_2(y) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}\left(3\cos^2(y) - 1\right)\,.$$

Demuestre que $\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}} f(x) = f(x+1)$**, y más generalmente que** $\mathrm{e}^{\delta\frac{d}{dx}} f(x) = f(x+\delta)$**.**

Solución:

Primero probamos que para el caso $f(x) = x^k$ se cumple que $\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}} x^k = (x+1)^k$:

Usamos la expansión

$$\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,\frac{d^n}{dx^n}\;,$$

entonces para un monomio x^k,

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{dx^n}\,x^k &= k(k-1)(k-2)\dots(k-n+1)x^{k-n} \\ &= \frac{k!}{(k-n)!}x^{k-n}\,, \quad n\le k\end{aligned}$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}}x^k &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\,x^k = \sum_{n=0}^{k}\frac{1}{n!}\frac{k!}{(k-n)!}x^{k-n} \\ &= \sum_{n=0}^{k}\binom{k}{n}x^{k-n} = (x+1)^k\,.\end{aligned}$$

Ahora, para cualquier función analítica u holomórfica (que admite una representación local en serie de potencias) podemos escribir

$$f(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\mathsf{f}_k x^k\,,$$

donde f_k son ciertos coeficientes numéricos. Por lo tanto

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}}f(x) &= \mathrm{e}^{\frac{d}{dx}}\sum_{k=0}^{\infty}\mathsf{f}_k x^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\mathsf{f}_k\,\mathrm{e}^{\frac{d}{dx}}x^k = \sum_{k=0}^{\infty}\mathsf{f}_k\,(x+1)^k = f(x+1)\,.\end{aligned}$$

Demuestre la siguiente identidad entre operadores

$$\left(x\frac{d}{dx}x\right)^n = x^n\frac{d^n}{dx^n}x^n\,. \tag{C.6}$$

Hint: Demuestre que $[\frac{d}{dx},x]=\frac{d}{dx}x-x\frac{d}{dx}=1$, y úselo para intercambiar el orden de los operadores.

Solución:

La demostración se hace por inducción: (a) para $n = 1$ vemos que la relación (C.6) es cierta de manera trivial, (b) suponemos que la relación es válida para n y probamos que es correcta para $n + 1$:

$$\left(x\frac{d}{dx}x\right)^{n+1} = \left(x\frac{d}{dx}x\right)\left(x\frac{d}{dx}x\right)^{n} = \left(x\frac{d}{dx}x\right)x^{n}\frac{d^{n}}{dx^{n}}x^{n} .$$

Vamos a simplificar la notación definiendo: $\frac{d}{dx} = a\,, x = b\,,$ con lo que el conmutador es $[a, b] = ab - ba = 1$. Entonces, queremos probar que

$$(bab)^{n+1} = b^{n+1}a^{n+1}b^{n+1} . \tag{C.7}$$

Para esto vamos a usar la relación $ab = ba + 1$ para intercambiar el orden. En general, tenemos:

$$\begin{aligned} ab^{n} &= (ab)\, b^{n-1} = (ba + 1)\, b^{n-1} = bab^{n-1} + b^{n-1} \\ &= b(ba + 1)b^{n-2} + b^{n-1} = b^{2}ab^{n-2} + 2b^{n-1} \\ &\dots \\ &= b^{n}a + nb^{n-1} . \end{aligned} \tag{C.8}$$

Y, de manera similar

$$ba^{n} = a^{n}b - na^{n-1} . \tag{C.9}$$

El lado izquierdo de (C.7) lo podemos expresar como

$$\begin{aligned} (bab)^{n+1} &= (bab)(bab)^{n} = (bab)(b^{n}a^{n}b^{n}) , \\ &= b\, ab^{n+1}\, a^{n}b^{n} , \end{aligned} \tag{C.10}$$

y queremos mover, en primer lugar, el operador a enfrente del operador b^{n+1} al lado derecho. Entonces, usando la relación (C.8) en (C.10) obtenemos

$$\begin{aligned} &= b\, \left(b^{n+1}a + (n + 1)b^{n}\right)\, a^{n}b^{n} \\ &= b^{n+1}b\, a^{n+1}b^{n} + (n + 1)b^{n+1}\, a^{n}b^{n} , \end{aligned}$$

y luego, usando (C.9), intercambiamos el orden en el producto $b\,a^{n+1}$ en el primer término:

$$\begin{aligned} &= b^{n+1}\left(a^{n+1}b - (n+1)a^n\right) b^n + (n+1)b^{n+1}\,a^n b^n\,, \\ &= b^{n+1}a^{n+1}b^{n+1}\,. \end{aligned}$$

Encuentre el valor explícito de la constante $c(\epsilon)$ para la siguiente representación de la función delta

$$\delta(x) \;=\; \lim_{\epsilon\to 0} c(\epsilon)\, e^{-\frac{x^2}{\epsilon}}\;. \tag{C.11}$$

Solución:

La constante $c(\epsilon)$ se determina imponiendo la condición de normalización,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1\,, \tag{C.12}$$

al sustituir la representación (C.11) tenemos que[1],

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx &= \lim_{\epsilon\to 0} c(\epsilon) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{\epsilon}}\,dx \\ &= \lim_{\epsilon\to 0} c(\epsilon)\sqrt{\epsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}dy\,; \qquad y = \frac{x}{\sqrt{\epsilon}} \\ &= \lim_{\epsilon\to 0} c(\epsilon)\sqrt{\epsilon\,\pi} \\ &\stackrel{!}{=} 1\,, \end{aligned} \tag{C.13}$$

y por lo tanto la condición de normalización (C.12) requiere

$$c(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\,\pi}}\,. \tag{C.14}$$

[1]En general la operación de límite y la de integración *no conmutan*, pero recordemos que desde un punto de vista matemático la función delta no es una función sino una distribución.

Para una Matriz H de 2×2, calcular t_1, t_2, t_3 donde

$$t_p \equiv TrH^p \qquad p = 1, 2, 3, ... \tag{C.15}$$

Demostrar que

$$t_3 = \alpha t_1^3 + \beta t_1 t_2 \, . \tag{C.16}$$

Encuentre los coeficientes α, β .

Solución:

Sea

$$H = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \tag{C.17}$$

donde a, b, c, d son números complejos arbitrarios. De forma directa calculamos H^2 y H^3,

$$\begin{aligned} H^2 &= \begin{pmatrix} a^2 + bc & b\,TrH \\ c\,TrH & d^2 + bc \end{pmatrix} , \\ H^3 &= \begin{pmatrix} a(a^2 + bc) + bc\,TrH & ab\,TrH + b(d^2 + bc) \\ c(a^2 + bc) + dc\,TrH & bc\,TrH + d(d^2 + bc) \end{pmatrix} , \end{aligned} \tag{C.18}$$

entonces

$$\begin{aligned} t_1 &= a + d \, , \\ t_2 &= a^2 + d^2 + 2bc \, , \\ t_3 &= a^3 + d^3 + 3abc + 3bcd \, , \end{aligned} \tag{C.19}$$

Sustituyendo (C.19) en (C.16) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 1 \, , \\ 3\alpha + \beta &= 0 \, , \end{aligned} \tag{C.20}$$

que nos da $\alpha = -\frac{1}{2}$ y $\beta = \frac{3}{2}$.

Considere el potencial anarmónico en una dimensión

$$V(x) = x^2 + gx^4 \,. \tag{C.21}$$

Encuentre la representación matricial del Hamiltoniano $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + gx^4 \,, \tag{C.22}$$

en la base ortonormal de eigenfunciones del oscilador armónico $1-$Dim, para los casos particulares

$$H_{2\times 2} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{02} \\ h_{20} & h_{22} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad H_{3\times 3} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{02} & h_{04} \\ h_{20} & h_{22} & h_{24} \\ h_{40} & h_{42} & h_{44} \end{pmatrix} \tag{C.23}$$

encuentre las energías y compare.

Solución:

Los elementos de matriz se denotarán como

$$h_{ij} = (\psi_i,\, \mathcal{H}\psi_j) \,. \tag{C.24}$$

Tenemos que

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{OA}} + gx^4 \,, \tag{C.25}$$

donde $\mathcal{H}^{\text{OA}}$ es el Hamiltoniano del oscilador armónico. La representación matricial de $\mathcal{H}^{\text{OA}}$ en la base de sus eigenfunciones evidentemente es diagonal y esta dada por,

$$h_{ij}^{\text{OA}} = (\psi_i,\, \mathcal{H}^{\text{OA}}\psi_j) = E_j(\psi_i,\, \psi_j) = \delta_{i,j}\, E_j \,. \tag{C.26}$$

donde $E_j = 2(j + \frac{1}{2})$, $(j = 0, 1, 2, ...)$. Entonces, sólo resta determinar los elementos de matriz del término gx^4, una ma-

nera elegante y muy simple de hacerlo es introduciendo los operadores a y $a^\dagger$ definidos por[2]

$$a^\dagger\psi_n(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)\,. \quad \text{(C.27)}$$

$$a\psi_n(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x)\,. \quad \text{(C.28)}$$

donde $\psi_n(x)$ es la eigenfunción enésima de $\mathcal{H}^{OA}$, de aqui que a y $a^\dagger$ se denominen operadores de descenso (o de aniquilación) y ascenso (o de creación) respectivamente. De (C.27) y (C.28) se sigue que,

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)\,. \quad \text{(C.29)}$$

con lo cual fácilmente obtenemos que

$$\begin{aligned} g(\psi_m,\, x^4\psi_n) = \frac{g}{4}\Big\{ & \left[6n(n+1)+3\right]\delta_{m,n} \\ & + (4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} \\ & + (4m+6)\sqrt{(m+1)(m+2)}\,\delta_{m+2,n} \\ & + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\,\delta_{m,n+4} \\ & + \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\,\delta_{m+4,n}\Big\}\,. \end{aligned} \quad \text{(C.30)}$$

La relación anterior se ha escrito explícitamente en forma simétrica respecto de los índices $m, n = 0, 1, 2, \ldots$.

[2]En términos de los operadores de creación y aniquilación el Hamiltoniano de oscilador armónico es $\mathcal{H}^{\rm OA} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 = 2(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. Los operadores a y $a^\dagger$ satisfacen la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$.

De la ecuación (C.29) obtenemos

$$x^2 = \frac{1}{2}\left(a^{\dagger 2} + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a\right) = \frac{1}{2}\left(a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1\right)$$
$$= \frac{1}{2}\left(a^{\dagger 2} + a^2 + 2\hat{n} + 1\right) \tag{C.31}$$

y

$$x^4 = \frac{1}{4}\left(a^{\dagger 2} + a^2 + 2\hat{n} + 1\right)\left(a^{\dagger 2} + a^2 + 2\hat{n} + 1\right)$$
$$= \frac{1}{4}\Big(a^{\dagger 2}a^2 + a^2 a^{\dagger 2} + (2\hat{n}+1)^2$$
$$+ a^{\dagger 2}(2\hat{n}+1) + (2\hat{n}+1)a^{\dagger 2} + a^2(2\hat{n}+1) + (2\hat{n}+1)a^2$$
$$+ a^{\dagger 4} + a^4\Big) \tag{C.32}$$

a partir de la cual obtenemos el resultado (C.30).

Una forma alternativa de obtener el resultado anterior es usando la forma explícitas de las eigenfunciones del oscilador armónico

$$\mathcal{H}^{\mathrm{OA}}\psi_n(x) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)\,, \tag{C.33}$$

las cuales son

$$\psi_n(x) = \frac{H_m(x)}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}\, e^{-x^2/2}\,, \quad E_n = 2n+1\,, \quad n = 0, 1, 2\ldots \tag{C.34}$$

donde $H_n(x)$ es el polinomio de Hermite de grado n con normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x)H_n(x)dx = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad m \neq n, \\ \sqrt{\pi}2^n n! & \text{si} \quad m = n. \end{cases} \tag{C.35}$$

Con esta definición, las eigenfunciones del oscilador armónico (C.34) forman una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$ con

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{m,n}\,.$$

Entonces, para encontrar la forma matricial del Hamiltoniano (C.22) sólo tenemos que encontrar los elementos de matriz del operador x^4, *i.e.*

$$\langle\psi_m|x^4|\psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)\, x^4\, \psi_n(x)\, \mathrm{d}x \qquad \text{(C.36)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^m m!}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x)\, x^4\, H_n(x) \mathrm{d}x\,.$$

El cálculo se simplifica si usamos las relaciones de recurrencia para los polinomios de Hermite:

$$\begin{aligned} H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - H_n'(x), \\ H_n'(x) &= 2nH_{n-1}(x), \\ H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \end{aligned}$$

de donde obtenemos

$$xH_n(x) = \frac{1}{2}H_{n+1}(x) + nH_{n-1}(x),$$

y, recursivamente

$$x^2H_n(x) = (n+\frac{1}{2})H_n(x) + n(n-1)H_{n-2}(x) + \frac{1}{4}H_{n+2}(x)\,,$$

con lo que podemos expresar el elemento de matriz (C.36) en términos de productos de polinomios de Hermite. Luego, usando las relaciones de ortonormalidad (C.35) obtenemos, después de sencillas simplificaciones:

$$H_{m\,n} = (2n+1)\delta_{m,n} + \frac{g}{4}\Bigg\{ \left[6n(n+1)+3\right]\delta_{m,n} \qquad \text{(C.37)}$$
$$+ (4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2}$$
$$+ (4m+6)\sqrt{(m+1)(m+2)}\,\delta_{m+2,n}$$
$$+ \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\,\delta_{m,n+4}$$
$$+ \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\,\delta_{m+4,n}\Bigg\}\,.$$

g	$E_0^{2\times 2}$	$E_0^{3\times 3}$	$E_0^{50\times 50}$	$E_0^{100\times 100}$
0	1	1	1	1
0.01	1.007389979	1.007373708	1.00737367208142	1.00737367208142
0.1	1.065833474	1.065375665	1.06528550954737811	1.06528550954737855
0.2	1.119129822	1.118771177	1.11829265438219205	1.11829265438219205
0.3	1.165087978	1.165046952	1.16404715738529796	1.16404715738529796
0.4	1.206415533	1.206298232	1.20481032742354666	1.20481032742354777
0.5	1.244646133	1.243728616	1.24185405959968342	1.24185405959968120
0.6	1.280708470	1.278135926	1.27598356638348220	1.27598356638348220
0.7	1.315195900	1.310091493	1.30774865127032136	1.30774865127031958
0.8	1.348504465	1.340023638	1.33754520842558433	1.33754520842558233
0.9	1.380908260	1.368263266	1.36566982583396679	1.36566982583397034
1.0	1.412602835	1.395071528	1.39235164178206317	1.39235164178206317
10.0	3.934507665	2.874453184	2.44917407995217	2.44917407993716

De aquí obtenemos los casos particulares

$$H_{2\times 2}^{\text{par}} = \begin{pmatrix} 1+\frac{3}{4}\,g & \frac{3}{\sqrt{2}}\,g \\ \frac{3}{\sqrt{2}}\,g & 5+\frac{39}{4}\,g \end{pmatrix}$$

$$E = 3 + \frac{21}{4}\,g \pm \frac{1}{2}\,\sqrt{16+72\,g+99\,g^2}$$

y

$$H_{3\times 3}^{\text{par}} = \begin{pmatrix} 1+\frac{3}{4}\,g & \frac{3}{\sqrt{2}}\,g & \sqrt{\frac{3}{2}}\,g \\ \frac{3}{\sqrt{2}}\,g & 5+\frac{39}{4}\,g & 7\,g\sqrt{3} \\ \sqrt{\frac{3}{2}}\,g & 7\,g\sqrt{3} & 9+\frac{123}{4}\,g \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1+3/4\,g & 3/2\,g\sqrt{2} & 1/2\,g\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 3/2\,g\sqrt{2} & 5+\frac{39}{4}\,g & 7\,g\sqrt{3} & 3/2\,g\sqrt{10} & 0 & 0 \\ 1/2\,g\sqrt{6} & 7\,g\sqrt{3} & 9+\frac{123}{4}\,g & 11/2\,g\sqrt{30} & g\sqrt{105} & 0 \\ 0 & 3/2\,g\sqrt{10} & 11/2\,g\sqrt{30} & 13+\frac{255}{4}\,g & 15\,g\sqrt{14} & 3\,g\sqrt{35} \\ 0 & 0 & g\sqrt{105} & 15\,g\sqrt{14} & 17+\frac{435}{4}\,g & \frac{57}{2}\,g\sqrt{10} \\ 0 & 0 & 0 & 3\,g\sqrt{35} & \frac{57}{2}\,g\sqrt{10} & 21+\frac{663}{4}\,g \end{bmatrix}$$

g	$E_2^{2\times 2}$	$E_2^{3\times 3}$	$E_2^{50\times 50}$	$E_2^{100\times 100}$
0	5	5	5	5
0.01	5.097610021	5.094117603	5.09393913274415	5.09393913274415
0.1	5.984166526	5.750190683	5.74795926894111364	5.74795926894111187
0.2	6.980870178	6.309554777	6.27724861732463690	6.27724861732463957
0.3	7.984912022	6.813763543	6.70571937830636156	6.70571937830635978
0.4	8.993584467	7.296989055	7.07259872680100443	7.07259872680101331
0.5	10.00535387	7.770866495	7.39690063905848572	7.39690063905848572
0.6	11.01929153	8.240212267	7.68956529571340930	7.68956529571341285
0.7	12.03480410	8.707283917	7.95756841873814658	7.95756841873815102
0.8	13.05149554	9.173229367	8.20567739152462217	8.20567739152461151
0.9	14.06909174	9.638664292	8.43731843353100075	8.43731843353098832
1.0	15.08739716	10.10392983	8.65504995984711378	8.65504995984710668
10.0	107.0654923	52.32986807	16.6359214896798	16.6359214881254

APÉNDICE D

Sturm-Liouville: Algunos Teoremas

El problema de Sturm-Liouville es

$$Lu \;=\; -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}u\right) + q(x)u \;=\; \lambda u\,, \qquad \text{(D.1)}$$

en donde $p(x)$ y $q(x)$ son algunas funciones usualmente con condiciones $p(x) > 0$ y $q(x) \geq 0$, el dominio de definición del problema $x \in [0, \ell]$, y λ es un eigenvalor real (el *operador de Sturm-Liouville* es Hermitiano).

Teorema: para dos soluciones u_1, u_2 del problema de Sturm-Liouville (D.1) se tiene que

$$(pW)' \;=\; (\lambda_1 - \lambda_2)u_1\, u_2\ ,$$

en donde W es el Wronskiano de las soluciones u_1, u_2 correspondientes a los eigenvalores λ_1, λ_2 respectivamente.

Corolario: si u_1, u_2 son una solución fundamental del problema de Sturm-Liouville (D.1) para el eigenvalor λ se tiene

que

$$(pW)' \;=\; 0\;.$$

Demostración: Para dos soluciones u_1, u_2 del problema de Sturm-Liouville (D.1), el Wronskiano es $W(x) = u_1\,u_2' - u_1'\,u_2$. Multiplicando este Wronskiano por la función $p(x)$, reorganizando y derivando obtenemos

$$\begin{aligned}(pW)' &= (p\,u_1\,u_2' - p\,u_1'\,u_2)' \\ &= (u_1\,(p\,u_2') - u_2\,(p\,u_1'))' \\ &= u_1\,(p\,u_2')' + \cancel{u_1'\,(p\,u_2')} - u_2\,(p\,u_1')' - \cancel{u_2'\,(p\,u_1')} \\ &= u_1\,(p\,u_2')' - u_2\,(p\,u_1')'\;. \end{aligned} \tag{D.2}$$

Como u_1, u_2 son soluciones de (D.1) correspondientes a los eigenvalores λ_1, λ_2 respectivamente:

$$(p\,u_2')' = (q - \lambda_2)\,u_2\,,$$

$$(p\,u_1')' = (q - \lambda_1)\,u_1\,.$$

Substituyendo en (D.2) obtenemos

$$(pW)' = (\lambda_1 - \lambda_2)\,u_1\,u_2\,. \tag{D.3}$$

APÉNDICE E

El Potencial de Pöschl-Teller

El Hamiltoniano para el problema de Pöschl-Teller es

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{A}{\cosh^2 x}\,, \qquad x \in (-\infty, +\infty) \tag{E.1}$$

con A un parámetro positivo que determina la profundidad del pozo de potencial.

Estado Base. Proponemos una función sin nodos de la forma

$$\psi_0 = \cosh(x)^a\,, \tag{E.2}$$

con a un parámetro real. El potencial asociado con esta función de onda es

$$V_0 - E_0 = \frac{\psi_0''}{\psi_0} = -\frac{a(a-1)}{\cosh(x)^2} + a^2\,. \tag{E.3}$$

Entonces si hacemos la identificación

$$a(a-1) = A\,, \tag{E.4}$$

vemos que la función de onda (E.2) es una eigenfunción del Hamiltoniano de Pöschl-Teller (E.1) con energía $E_0 = -a^2$. Sin embargo, la ecuación (E.4) tiene dos posibles soluciones:

$$a = \frac{1}{2}\left(1 \pm \sqrt{1+4A}\right) .$$

La solución con $a > 0$, de hecho $a > 1$, corresponde a una solución (E.2) no-normalizable. Entonces la solución física corresponde a valores negativos *i.e.* $a < 0$.

Transformación de norma. Vamos a suponer que las eigenfunciones del Hamiltoniano (E.1) se pueden factorizar como

$$\psi_n(x) = \psi_0(x)\varphi(x) , \tag{E.5}$$

en donde $\psi_0(x)$ es la eigenfunción del estado base. En este caso, las funciones $\varphi_n(x)$ serán eigenfunciones del Hamiltoniano transformado

$$h = \psi_0^{-1}(H - E_0)\psi_0 , \tag{E.6}$$

en donde al sustraer E_0, hemos movido el nivel de referencia de la energía a cero, es decir que la ecuación de eigenvalores $h\varphi_n(x) = \epsilon_n\varphi_n(x)$ tendrá eigenvalores positivos $\epsilon_n > 0$. Si escribimos

$$\psi_0 = e^{\phi_0} = e^{a\log\cosh(x)} ,$$

el operador derivada se transforma en un operador derivada covariante como

$$\psi_0^{-1}\frac{d}{dx}\psi_0 = \frac{d}{dx} + \phi_0' .$$

Entonces

$$h = -\left(\frac{d}{dx} + \phi_0'\right)^2 - \frac{A}{\cosh^2 x} - E_0 ,$$

con $\phi_0' = a\tanh(x)$. Simplificando el operador h obtenemos

$$h = -\frac{d^2}{dx^2} - 2a\tanh(x)\frac{d}{dx} . \tag{E.7}$$

Como veremos, este Hamiltoniano escrito en variables adecuadas, tiene soluciones polinomiales.

Solución
Dado que el problema tiene la simetría $x \to -x$ se propone el siguiente cambio de variables[1]

$$z = \cosh(2x) = \sinh^2(x) + \cosh^2(x)\,, \tag{E.8}$$

$$z \in [1, \infty)\,.$$

$$\frac{d}{dx} = \left(\frac{dz}{dx}\right)\frac{d}{dz} = 4\sinh(x)\cosh(x)\frac{d}{dz}\,,$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \left(\frac{dz}{dx}\right)^2\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{d^2z}{dx^2}\right)\frac{d}{dz} = 4(z^2-1)\frac{d^2}{dz^2} + 4z\frac{d}{dz}\,,$$

obtenemos

$$h = 4(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2} + 4\Big(a - (a+1)\,z\Big)\frac{d}{dz}\,. \tag{E.9}$$

Este operador es un caso particular del *operador de Jacobi*:

$$h_{\text{Jacobi}} = (1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2} + \Big(\beta - \alpha - (\alpha+\beta+2)\xi\Big)\frac{d}{d\xi}\,, \tag{E.10}$$

en donde α, β son parámetros. Este operador tiene eigenfunciones polinomiales

$$h_{\text{Jacobi}} P_n^{(\alpha,\beta)}(\xi) = \varepsilon_n P_n^{(\alpha,\beta)}(\xi)\,, \tag{E.11}$$

[1] $z = \cosh(2x) = 2\cosh^2(x) - 1 = 2\sinh^2(x) + 1$, entonces tenemos que $\cosh(x) = +\sqrt{(z+1)/2} \geq 1$, y $\sinh(x) = \pm\sqrt{(z-1)/2}$. También $\frac{d}{dx} = \left(\frac{dz}{dx}\right)\frac{d}{dz} = 4\sinh(x)\cosh(x)\frac{d}{dz}$, y por lo tanto $2a\tanh(x)\frac{d}{dx} = 8a\sinh^2(x)\frac{d}{dz} = 4a(z-1)\frac{d}{dz}$.

en donde a $P_n^{(\alpha,\beta)}(\xi)$ se les llama polinomios de Jacobi[2] de indices (α, β). Comparando (E.9) (absorbiendo el factor 4 en la definición de los eigenvalores) con (E.10) podemos identificar

$$\beta = a - 1/2\,, \quad \alpha = -1/2\,. \tag{E.12}$$

Por lo tanto las eigenfunciones del operador (E.9) son los polinomios de Jacobi

$$\varphi_n(x(z)) = P_n^{(-1/2,\,a-1/2)}(z)\,. \tag{E.13}$$

Solución alternativa
Hacemos el siguiente cambio de variables

$$z = \tanh(x), \qquad z \in (-1, 1)\,, \tag{E.14}$$

consecuentemente

$$\frac{d}{dx} = \left(\frac{dz}{dx}\right)\frac{d}{dz} = (1-z^2)\frac{d}{dz}\,,$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \left(\frac{dz}{dx}\right)^2\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{d^2z}{dx^2}\right)\frac{d}{dz} = (1-z^2)^2\frac{d^2}{dz^2} - 2z(1-z^2)\frac{d}{dz}\,.$$

El Hamiltoniano transformado h (Ec. E.7) toma la forma

$$h = -(z-1)^2(z+1)^2\frac{d^2}{dz^2} - 2z(z-1)(z+1)(1-a)\frac{d}{dz}\,, \tag{E.15}$$

ó, extrayendo un factor común:

$$h = -(z-1)(z+1)\Big[(z-1)(z+1)\frac{d^2}{dz^2} + 2z\,(1-a)\frac{d}{dz}\Big]\,, \tag{E.16}$$

[2]Los polinomios de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}(\xi)$ son polinomios ortogonales con respecto de la función de peso $(1-\xi)^\alpha(1+\xi)^\beta$ $(\alpha > -1, \beta > -1)$ en el intervalo $[-1, 1]$. Los polinomios de Legendre y Chebyshev son casos especiales de los polinomios de Jacobi.

Espectro. Para encontrar los eigenvalores del operador h nos fijamos en la graduación[3] de los términos en el Hamiltoniano (E.10). Basta con fijarnos en los términos de graduación cero para obtener

$$\begin{aligned} h_{\text{Jacobi}}\,\xi^n &\simeq -n(n-1)\xi^n - (\alpha+\beta+2)n\xi^n + \mathcal{O}(\xi^{n-1})\,, \\ &= \Big(-n(n-1) - (\alpha+\beta+2)n\Big)\xi^n + \dots \\ &= -n(n+\alpha+\beta+1)\xi^n + \dots \end{aligned}$$

de donde se obtienen los eigenvalores de la ecuación (E.11):

$$\varepsilon_n = -n(n+\alpha+\beta+1)\,. \tag{E.17}$$

Para obtener los eigenvalores del operador h (Ec. (E.9))

$$h\varphi_n(z) = 4\,h_{\text{Jacobi}}^{(\alpha=-1/2,\beta=a-1/2)}\varphi_n(z) = \epsilon_n\varphi_n(z)\,, \tag{E.18}$$

Entonces, recuperando el factor 4 que absorbimos en la definición de los eigenvalores se obtiene

$$\varepsilon_n = \frac{1}{4}\epsilon_n = -n(n+\alpha+\beta+1)\,.$$

y usando las relaciones $\beta = a - 1/2\,, \alpha = -1/2$, se llega finalmente a

$$\epsilon_n = -4n(n+a)\,.$$

$$E_n = \epsilon_n + E_0 = -4n(n+a) - a^2\,, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Dado que $\epsilon_n > 0$ (y que $a < 0$) entonces vemos inmediatamente que tenemos un número finito de estados ligados excitados con

$$E_0 < E_n \leq 0\,, \quad n = 1, 2, \dots \lfloor |a| \rfloor\,,$$

[3]La graduación (grading) de un operador diferencial nos dice cómo cambia el grado de un monomio bajo la acción de dicho operador. Por ejemplo para el operador $z^k \frac{d^\ell}{dz^\ell} z^n \propto z^{n-\ell+k}$, la graduación es $-\ell + k$.

en donde $\lfloor |a| \rfloor$ indica el *piso* de $|a|$, es decir, el máximo número entero menor que $|a|$.

Referencia:
Pöschl, G.; Teller, E. (1933). "Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators". Zeitschrift für Physik 83 (3-4): 143-151. doi:10.1007/BF01331132

APÉNDICE F

Algunas Integrales

La función exponencial es una función que aparece recurrentemente en la física. En primer lugar recordamos que la función exponencial tiene una representación de Taylor dada por

$$\mathrm{e}^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}\,, \quad x \in \mathbb{R}\,. \tag{F.1}$$

En esta sección vamos a estudiar algunas integrales particulares que involucran a la función exponencial y que son solubles analíticamente. En particular

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x}\, dx = \mathrm{e}^{-x}\Big|_\infty^0 = 1\,.$$

Esta integral no es de mucho interés, pero la siguiente integral[1] tiene mucha importancia en la mecánica cuántica:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{e}^{-\alpha r}\, d^3\, x.$$

[1] Esta integral corresponde a la integral de normalización de la función de onda del estado base del átomo de hidrógeno.

Esta integral depende del parámetro α, por lo tanto podemos denotarla como $I(\alpha)$. Ahora bien, haciendo un simple análisis dimensional, vemos que las dimensiones del parámetro α son las del inverso de la longitud $[L]^{-1}$, mientras que la dimensión de toda la integral es de volumen $[L]^3$. Entonces, mediante este simple argumento podemos inmediatamente decir que la integral $I(\alpha)$ depende de α en la forma

$$I(\alpha) = \frac{C}{\alpha^3}\,,$$

en donde C es una constante. De hecho, eligiendo $\alpha = 1$ vemos que $C = I(1)$. El valor numérico de la constante C lo podemos encontrar resolviendo explícitamente la integral en coordenadas esféricas:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{e}^{-r} d^3x = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^2 \mathrm{e}^{-r} dr$$

$$= 4\pi\,\Gamma(3) = 4\pi\,\cdot 2! = 8\pi\,.$$

Por lo tanto

$$I(\alpha) = \frac{8\pi}{\alpha^3}\,.$$

De manera similar obtenemos la siguiente integral básica

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}\, d^3\, x = \frac{2\pi}{\alpha^2}.$$

Integral exacta de dos electrones

Consideremos ahora la siguiente integral

$$\mathcal{I} \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}}\;. \qquad \text{(F.2)}$$

Para evaluar esta integral introducimos una nueva integral auxiliar

$$\tilde{I} \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2 \frac{1}{r_1 r_2 r_{12}}\, e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}}\;, \qquad \text{(F.3)}$$

a partir de la cual se puede evaluar la integral (F.2) mediante diferenciación respecto de los parámetros $\alpha_{1,2}, \beta$. Esta integral auxiliar se puede evaluar analíticamente. Para esto vamos a suponer que $\mathbf{r}_1$ se encuentra sobre el eje z_2. Los vectores $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12}$ pueden verse como los vectores que forman un triángulo con θ_2 - el ángulo entre $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ (véase la figura (F.1)). Entonces

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2 \ .$$

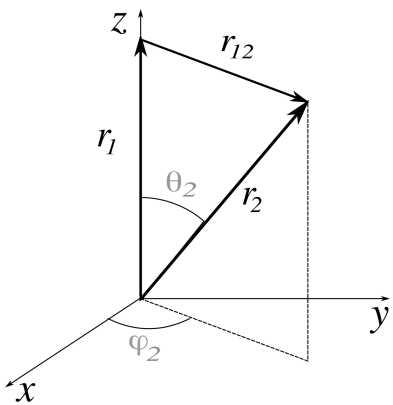


Figura F.1: Disposición geométrica de los vectores $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_{12}$.

La integral auxiliar $\tilde{I}$ se puede escribir en coordenadas esféricas

$$\tilde{I} \ = \ 8\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \, r_1 e^{-2\alpha_1 r_1} \int_0^\infty dr_2 \, r_2 e^{-2\alpha_2 r_2} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{r_{12}} d\cos\theta_2 \ ,$$

en donde el factor $8\pi^2$ resulta de la integración sobre los ángulos

$$\int_0^\pi \sin(\theta_1) d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \ = \ 8\pi^2 \ .$$

De la relación entre r_1, r_2 y r_{12} se obtiene una relación entre $d\cos\theta_2$ y dr_{12}:

$$dr_{12}^2 = 2r_{12}dr_{12} = -2d(r_1 r_2 \cos\theta_2)$$

o

$$d(r_1 r_2 \cos\theta_2) = -r_{12}dr_{12}\,,$$

y los límites de integración correspondientes son $r_{12} = r_1 + r_2$ para $\cos\theta_2 = +1$, y $r_{12} = |r_1 - r_2|$ para $\cos\theta_2 = -1$. Entonces, podemos integrar sobre dr_{12} con lo que obtenemos

$$\tilde{I} = 8\pi^2 \int_0^\infty dr_1\, e^{-2\alpha_1 r_1} \int_0^\infty dr_2\, e^{-2\alpha_2 r_2} \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} e^{2\beta r_{12}} dr_{12}\ .$$

Evaluamos primero la integral sobre dr_{12}:

$$\tilde{I} = \frac{8\pi^2}{2\beta} \int_0^\infty dr_1\, e^{-2\alpha_1 r_1} \int_0^\infty dr_2\, e^{-2\alpha_2 r_2} \{e^{2\beta(r_1+r_2)} - e^{2\beta|r_1-r_2|}\}\ . \tag{F.4}$$

Consideremos el primer término en (F.4):

$$\int_0^\infty dr_1\, e^{-2(\alpha_1-\beta)r_1} \int_0^\infty dr_2\, e^{-2(\alpha_2-\beta)r_2} = \frac{1}{4(\alpha_1-\beta)(\alpha_2-\beta)}\ ,$$

siempre que $\alpha_1 - \beta > 0$ y $\alpha_2 - \beta > 0$.

Para evaluar el segundo término en (F.4) tenemos que dividir la integración en el cuadrante del plano (r_1, r_2) mediante la línea $r_1 = r_2$ en dos casos:

$$\begin{cases} r_1 \le r_2 \quad \text{(a)} \quad r_1 = (0,\infty)\ ,\ r_2 = (r_1,\infty)\ , \\ r_1 > r_2 \quad \text{(b)} \quad r_1 = (0,\infty)\ ,\ r_2 = (0,r_1)\ , \\ \qquad\qquad\ \text{o} \quad r_2 = (0,\infty)\ ,\ r_1 = (r_2,\infty)\ . \end{cases}$$

Las integrales que resultan en ambos casos son similares. Para el primer caso se tiene:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dr_1\, e^{-2\alpha_1 r_1} \int_{r_1}^\infty dr_2\, e^{-2\alpha_2 r_2} e^{2\beta(r_2-r_1)} \\
&= \int_0^\infty dr_1\, e^{-2(\alpha_1+\beta) r_1} \int_{r_1}^\infty dr_2\, e^{-2(\alpha_2-\beta) r_2} \\
&= \int_0^\infty dr_1\, e^{-2(\alpha_1+\beta) r_1} \frac{1}{2(\alpha_2-\beta)}\, e^{-2(\alpha_2-\beta) r_1} \\
&= \frac{1}{4} \frac{1}{(\alpha_2-\beta)} \frac{1}{(\alpha_1+\alpha_2)} .
\end{aligned}$$

Juntando los términos obtenemos finalmente

$$\tilde{I} \;=\; \frac{2\pi^2}{(\alpha_1+\alpha_2)(\alpha_1-\beta)(\alpha_2-\beta)} \,. \tag{F.5}$$

Ahora ya estamos en posición de evaluar la integral (F.2) mediante diferenciación:

$$\mathcal{I} \;=\; \frac{1}{8} \frac{\partial}{\partial\alpha_1} \frac{\partial}{\partial\alpha_2} \frac{\partial}{\partial\beta} \tilde{I} \,.$$

En general podemos evaluar integrales de la forma

$$\begin{aligned}
&I_{(n_1,n_2,n_3)}(\alpha_1,\alpha_2,\beta) \;= \\
&\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2 \, [{r_1}^{n_1}\; {r_2}^{n_2}\; {r_{12}}^{n_3}] \mathrm{e}^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} \,,
\end{aligned} \tag{F.6}$$

para $n_1, n_2, n_3 = -1, 0, 1, 2...$ mediante diferenciación de la integral básica $\tilde{I}$ (F.3,F.5) respecto de los parámetros α_1, α_2 y β. Algunas de estas integrales son:

$$I_{(0,0,0)}(\alpha_1,\alpha_2,\beta) \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} \;=\; \frac{\pi^2 \left[(\alpha_{12}-\beta)^3 - \alpha_1\alpha_2\beta\right]}{\alpha_{12}^3 \left(\alpha_1-\beta\right)^3 \left(\alpha_2-\beta\right)^3} \,,$$

$$I_{(-1,0,0)}(\alpha_1,\alpha_2,\beta) \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, \frac{1}{r_1} e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} \;=\; \frac{\pi^2 \left[(\alpha_{12}-\beta)^2 - \alpha_2\beta\right]}{\alpha_{12}^2 \left(\alpha_1-\beta\right)^2 \left(\alpha_2-\beta\right)^3} \,,$$

$$I_{(0,0,-1)}(\alpha_1,\alpha_2,\beta) \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, \frac{1}{r_{12}} e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} \;=\; \frac{\pi^2\left[(\alpha_{12}-\beta)^2+\alpha_1\alpha_2\right]}{\alpha_{12}^3\,(\alpha_1-\beta)^2\,(\alpha_2-\beta)^2} \quad ,$$

con $\alpha_{12} \equiv \alpha_1 + \alpha_2$. Con las fórmulas anteriores también podemos calcular integrales de la forma:

$$J_{(n_1,n_2,n_3)}(\alpha_1,\alpha_2,\beta) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, \vec{n}_1\cdot\vec{n}_{12}\,\left[{r_1}^{n_1}\;{r_2}^{n_2}\;{r_{12}}^{n_3}\right]\, e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} \quad ,$$

en donde $\vec{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1$, $\vec{n}_{12} = \mathbf{r}_{12}/r_{12}$. En particular

$$\alpha_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}_2\, \vec{n}_1\cdot\vec{n}_{12}\; e^{-2\alpha_1 r_1 - 2\alpha_2 r_2 + 2\beta r_{12}} = \frac{\pi^2\alpha_{\mathbf{1}}\alpha_2\left[(\alpha_{12}-\beta)^2-\beta\alpha_{12}+\alpha_1\alpha_2\right]}{\alpha_{12}^3\,(\alpha_1-\beta)^3\,(\alpha_2-\beta)^3} \quad .$$

APÉNDICE G

Cuantización de Bohr-Sommerfeld

Consideremos un potencial que admite un movimiento clásico periódico en una dimensión. Tal movimiento manifiesta la existencia de (al menos) un mínimo en dicho potencial. La regla de cuantización de Bohr[1]-Sommerfeld[2] para sistemas con una trayectoria periódica en una dimensión es una condición sobre la variable de acción asociada, y se escribe como

$$\oint_{H(p,q)=E} p\,dq = nh, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{G.1}$$

[1]Niels Henrik David Bohr (Copenhague, 1885–1962) Físico danés es uno de los científicos mas sobresalientes e influyentes en el desarrollo de la física contemporánea. En 1922 recibió el Premio Nobel de Física "for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them". Fue alumno de Ernest Rutherford.

[2]Arnold Sommerfeld, (Königsberg 1868–1951) fue un sobresaliente físico alemán que se destaca, entre otras cosas, por haber supervisado la tesis de doctorado de muchos físicos destacados. Entre sus estudiantes se encuentran a los ganadores del Premio Nobel de Física Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Peter Debye y Hans Bethe, además tuvo entre sus alumnos a Linus Pauling entre otros.

en donde $q = q(t)$ es la coordenada a lo largo de la cual la trayectoria (de energía E constante) es periódica, $p = p(t)$ es su momento conjugado, n es un número entero que se denomina como *número cuántico*, y h es la constante de Planck. La integral se realiza sobre un periodo de la coordenada q.

- Por ejemplo, para una partícula de masa m que se mueve en una órbita circular con velocidad constante, en coordenadas polares (r, θ), la coordenada angular θ es periódica, y la coordenada radial r permanece constante. El momento conjugado a la coordenada θ es el momento angular $L = mr^2 d\theta/dt$ (una cantidad física conservada). Entonces la condición (G.1) se escribe como

$$\oint L\, d\theta = 2\pi L = nh, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

que es la regla de cuantización (del momento angular L) que Bohr (1913) dedujo para su modelo del átomo de hidrógeno[3]. En este caso el potencial correspondiente es $V = -ke^2/r$ (k es la constante de la fuerza de Coulomb y e es la carga eléctrica del electrón), y la condición de cuantización del momento angular conduce a la fórmula correcta de la cuantización de la energía $E_n \propto -1/n^2$ a partir de la cual Bohr derivó la fórmula generalizada de Balmer que describe las frecuencias de las líneas espectrales emitidas por el hidrógeno (transiciones entre diferentes niveles de energía):

$$\nu_{n,k} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad n, k = 1, 2, 3, \ldots \quad k > n\,,$$

en donde $R = 3{,}29025 \times 10^{15}$ciclos/seg es la constante de Rydberg. La fórmula original para la serie de Balmer en la región visible del espectro corresponde al caso

[3]Referencia: N. Bohr Dr. phil. (1913) XXXVII. *On the constitution of atoms and molecules*, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 26:153, 476-502, DOI: 10.1080/14786441308634993

$n = 2$. El caso $n = 1$ corresponde a la series espectral de Lyman en la región ultravioleta. Sommerfeld (1916) generalizó el modelo de Bohr agregando la condición de cuantización del movimiento radial periódico para considerar el caso de órbitas elípticas (Bohr sabía que la energía dependía sólo de la longitud del eje mayor de la elipse ($2a$) y no de su eccentricidad). Dicha condición se escribe como[4,5]

$$\oint p_r \, dr = n'h, \quad n' = 1, 2, 3, \ldots$$

En particular, con esta condición Sommerfeld fue capaz de explicar parcialmente la degeneración de los niveles energía que se observan en el efecto Zeeman con la energía total dependiendo de dos números cuánticos n, n' en la forma $E_{n,n'} \propto -1/(n + n')^2$.

Para el caso de una partícula confinada sujeta a un potencial unidimensional $V(q)$ la regla de cuantización (G.1) puede escribirse tomando en cuenta la relación[6] $E = p^2 + V(q)$ como

$$\frac{1}{\hbar}\int_A^B \sqrt{E - V(q)}\, dq = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + O(\hbar), \quad n = 0, 1, 2, 3 \ldots \tag{G.2}$$

[4]A. Sommerfeld (1915), "Zur Theorie der Balmerschen Serie", Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der K. B. Akademie der Wissenschaften zu München, (1915), 425-458; Eur. Phys. J. H 39, 157-177 (2014) - traducción al inglés.

[5]Wilson (1915) generalizó la condición de cuantización de Bohr para sistemas con varios grados de libertad, por lo que a veces a esta formulación se conoce como Quantización de Bohr-Wilson-Sommerfeld (William Wilson Ph.D. (1915) LXXXIII. *The quantum-theory of radiation and line spectra*, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 29 174, 795 - 802, DOI: 10.1080/14786440608635362

[6]Aqui se ha elegido convenientemente que la masa de la partícula tome el valor $m = 1/2$. En general la condición es $\frac{1}{\hbar}\int_A^B \sqrt{2m(E - V(q))}\, dq = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + O(\hbar),\ n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

en donde los límites de la integración A, B corresponden a los puntos de retorno en el potencial en donde $V(A) = V(B) = E$. En la fórmula (G.2) se ha agregado el término constante $(1/2)\pi$ que tiene su origen en el análisis de la aproximación semiclásica WKB[7, 8] de la ecuación de Schrödinger. La regla (G.2) se supone válida hasta correcciones de orden $O(\hbar)$. En general, esta fórmula es aproximada y, en particular, da resultados muy incorrectos para números cuánticos pequeños, pero aparece más y más precisa para números cuánticos grandes.

En principio, la condición de cuantización (G.2) se puede formular para cualquier potencial $V(q)$, y la solución para las energías de Bohr-Sommerfeld $E \equiv E_{\rm BS}^{(n)}$ siempre se puede obtener numéricamente para el n-ésimo estado. Para algunos potenciales excepcionales la condición de cuantización puede resolverse explícitamente para la energía en términos de algunas funciones conocidas analíticamente del número cuántico n, *i.e.*

$$E_{\rm BS}^{(n)} = E_{\rm BS}(n)\,, \tag{G.3}$$

en donde la energía $E_{\rm BS}(n)$ es una función explícita del número cuántico n.

[7] En la consideración semiclásica de la ecuación de Schrödinger (en el límite en donde $\hbar$ es pequeña con respecto de la acción clásica), la función de onda tiene un comportamiento oscilatorio en $q \in (A, B)$ y se propone de la forma $\psi(q) = e^{iS(q)/\hbar}$ en donde la *acción* $S(q)$ se expande en potencias de la constante de Planck reducida $\hbar$, i.e. $S(q) = S_0(q) + \hbar S_1(q) + \hbar^2 S_2(q) + \ldots$ En primera aproximación se encuentra que $S_0(q) = \int^q \sqrt{2m(E - V(q'))}dq'$ *i.e.* $S_0(q)$ es la acción clásica. Para potenciales suaves en una dimensión las condiciones de frontera (continuidad) de la función de onda en los puntos de retorno requiere que en el lado derecho de (G.1) en lugar del número cuántico n aparecezca la cantidad $n + \frac{1}{2}$ con lo que el caso $n = 0$ puede ser incluído en los posibles valores de n (véase Landau and Lifshitz, Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory, Third Edition 1977, Cap. VII, ecuaciones 47.5 y 48.2).

[8] H. A. Kramers, "Wellenmechanik un halbzahlige Quantizierung", Z. Phys. 39 (1926) 10, 828-840 (ecuación (17) página 832); M. L. Brillouin, "Remarques sur la Mécanique Ondulatoire" J. phys. radium (1926) 7, 353-368 (ecuación (44), página 364).

Una pregunta relevante es si la solución a la condición de Bohr-Sommerfeld describe correctamente los valores cuantizados de la energía del sistema. El potencial de oscilador armónico y el potencial de Coulomb se encuentran en esta clase de problemas para los que la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld puede resolverse explícitamente y darnos las fórmulas exactas para la energía cuantizada.

La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld puede considerarse como una ecuación transcedental para obtener las energías. Existen algunos casos para los que podemos resolver esta condición explícitamente:

- $V = |x|^m, \quad m > 0$
- $V = \log|x|$

Existen más casos? Esta es una pregunta aún abierta.

- Quizás el ejemplo más simple en el que la condición de Bohr-Sommerfeld puede resolverse explícitamente es el caso de un oscilador armónico unidimensional $V(x) = (1/2)m\omega^2 x^2$, en donde podemos poner $(1/2)m\omega^2 = 1$, *i.e.*

$$V = x^2\,.$$

La regla de cuantización (G.2) en este caso es[9]

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-\sqrt{E}}^{+\sqrt{E}} \sqrt{E-x^2}\,dx = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{x}{2}\sqrt{E-x^2} + \frac{E}{2}\arcsin\frac{x}{\sqrt{E}}\right]_{-\sqrt{E}}^{+\sqrt{E}}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\,\frac{E}{2}\,\pi = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0,1,2,3\ldots$$

[9]La integral $I = \int \sqrt{E-x^2}dx$ puede evaluarse fácilmente si se hace el cambio de variable $x = \sqrt{E}\sin\theta$ y se emplean identidades trigonométricas elementales.

en donde se ha usado el hecho de que en los puntos de retorno $x = \pm a$, $E = V(x = a) = a^2$. De esta relación se obtiene que[10]

$$E_{\rm BS}(n) = (2n + 1)\,\hbar, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

que es la fórmula exacta de la cuantización de la energía para el oscilador armónico en una dimensión.

- Potencial de Pozo Cuadrado Infinito

$$V = \begin{cases} 0 & -1 \leq x \leq +1 \\ \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases} \tag{G.4}$$

La regla de cuantización (G.2) es

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-1}^{+1} \sqrt{E}\,dx = \frac{1}{\hbar}\,2\sqrt{E}\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, 1, 2, 3\ldots$$

de donde obtenemos la fórmula explícita de cuantización para la energía:

$$E_{\rm BS}(n) = \frac{\hbar^2\pi^2}{4}\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \quad n = 0, 1, 2, 3\ldots \tag{G.5}$$

En este caso, la solución exacta de la ecuación de Schrödinger es

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{4}(n + 1)^2\,, \quad n = 0, 1, 2, 3\ldots \tag{G.6}$$

La razón por la cual las energías de Bohr-Sommerfeld no reproducen correctamente las energías exactas, en este caso, es que en la condición de cuantización (G.2) el lado derecho debe ser $(n + 1)\pi$. Esto se deduce como consecuencia de que en los puntos de retorno $x = \pm 1$,

[10] Recordemos que en (G.2) se tomó $m = 1/2$, y por lo tanto $\omega = 2$.

las condiciones de frontera de las eigenfunciones deben ser tales que $\psi(x = \pm 1) = 0$. El término aditivo que se agrega al número cuántico n en la fórmula (G.2) se conoce como la corrección (índice) de Maslov.

- Otro ejemplo es el del potencial logarítmico

$$V(x) = \log|x|\,. \tag{G.7}$$

En este caso, la regla de cuantización (G.2) es[11]

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}\int_{-\mathrm{e}^E}^{+\mathrm{e}^E}\sqrt{E-\log|x|}\,dx &= \frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}\sqrt{\log|a|-\log|x|}\,dx\\ &= \frac{1}{\hbar}\,a\sqrt{\pi} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\\ &\quad n = 0,1,2,3\ldots\end{aligned}$$

En los puntos de retorno $x = \pm a = \pm \mathrm{e}^E$, $E = V(x = a) = \log|a|$, entonces

$$E_{\mathrm{BS}}(n) = \log\left(\hbar\sqrt{\pi}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)\,, \quad n = 0,1,2,3,\ldots$$

Esta es una fórmula explícita[12], pero no describe correctamente los eigenvalores de la energía de la ecuación de

[11] En este caso la integral que necesitamos evaluar es $I = \int_0^a \sqrt{\log\left(\frac{a}{x}\right)}\,dx = \frac{a}{2}\sqrt{\pi}$, que se resuelve haciendo el cambio de variable $t = \sqrt{\log\left(\frac{a}{x}\right)}$, e integrando por partes con $u = t, dv = 2te^{-t^2}dt$.

[12] Esta fórmula la podemos comparar con la solución de la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld para el potencial logarítmico radial $V(r) = \epsilon\log(r/b)$:

$$E_{n,\ell=0} \simeq \log\left[\left(\frac{2}{b}\right)\left(\frac{\pi}{\epsilon}\right)^{1/2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right], \quad n = 0,1,2\ldots$$

cuando $\epsilon = 1, b = 1$ (Gesztesy y Pittner, J. Phys. A 11, (1978) 679-686). El factor 2, que aparece como una diferencia en ésta fórmula, se debe a que en el caso 2-dimensional la integración se realiza en el dominio de r que va desde cero hasta el punto de retorno. En la referencia citada $\hbar = 1$.

Schrödinger en el potencial (G.7). Para este potencial no existe una solución exacta pero existen soluciones numéricas de muy alta precisión con las que podemos comparar las energías $E_{\rm BS}$.

Es valioso mencionar que el potencial logarítmico puede considerarse como el límite $m \to 0$ de un potencial de potencia modificado

$$V_m = \frac{|x|^m - 1}{m}\,.$$

El límite $m \to +0$ es

$$V_m \simeq \log|x| + \frac{m}{2}\log^2|x| + \dots$$

En la siguiente sección se analizan los potenciales de potencia, aunque el límite de una potencia cero (potencial constante) no lo vamos a tratar.

Potenciales del tipo de potencia (power-like potentials) $V = |x|^m$

Para el caso de potenciales del tipo de potencia

$$V(x) = |x|^m\,, \quad m > 0\,, \tag{G.8}$$

la condición de cuantización (G.2) puede resolverse explícitamente y tiene como solución[13]:

$$E_{\rm BS}(n) = \left(\hbar M B\left(\frac{1}{2}, M\right)\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{\frac{1}{M}}\,, \tag{G.9}$$

$$M = \frac{1}{m} + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

[13]Véase por ejemplo la referencia "Power-like potentials: From the Bohr-Sommerfeld energies to exact ones", J.C. del Valle and A. V. Turbiner, Int. Jour. Mod. Phys. A 36 (2021), 2150221, DOI: 10.1142/S0217751X21502213

en donde $B\left(\frac{1}{2}, M\right)$ es la función[14] *beta* de Euler. Debemos notar que en general los potenciales de tipo de potencia (G.8) no son exactamente solubles, con la excepción de los casos $m = 2$ (oscilador armónico) y $m = \infty$.

Para obtener la fórmula (G.9) consideremos la integral que aparece en el lado izquierdo de la condición de cuantización (G.2)

$$I_m = \int_{-a}^{+a} \sqrt{E - |x|^m}\, dx = \int_{-E^{1/m}}^{+E^{1/m}} E^{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \frac{|x|^m}{E}}\, dx\,,$$
$$= 2\int_0^{+E^{1/m}} E^{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \frac{x^m}{E}}\, dx\,.$$

Los puntos de retorno aquí son $a = \pm E^{1/m}$. Si hacemos el cambio de variable

$$t = \frac{x^m}{E} \quad \Rightarrow \quad x = (E\,t)^{\frac{1}{m}}\,, \quad dx = \frac{E^{\frac{1}{m}}}{m} t^{\frac{1}{m}-1}\, dt\,,$$

obtenemos

$$I_m = 2\frac{E^{\frac{1}{2}+\frac{1}{m}}}{m} \int_0^1 (1-t)^{\frac{1}{2}}\, t^{\frac{1}{m}-1}\, dt = 2\frac{E^{\frac{m+2}{2m}}}{m}\, B\left(\frac{1}{m}, \frac{3}{2}\right)\,.$$

Es conveniente reescribir

$$B\left(\frac{1}{m}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{m}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}+1\right)} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2} \frac{m\Gamma\left(\frac{1}{m}+1\right)}{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)}$$
$$= \frac{1}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)^2}{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)} \frac{m\Gamma\left(\frac{1}{m}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{2}\frac{\pi\, m}{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)} \frac{1}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)}\,,$$

[14] La definición de la función Beta de Euler y su relación en términos de funciones Gamma de Euler es:

$$B(a,b) = \int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{b-1}\, dt = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}\,.$$

con lo que se obtiene

$$I_m = E^{\frac{2+m}{2m}} \frac{\pi}{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)} \frac{1}{B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)}\,.$$

Con esta integral, resolvemos la condición de cuantización (G.2) para la energía E con el resultado

$$E_{BS}(n) = \left[\hbar\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right) B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{m}+\frac{1}{2}\right)\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2m}{2+m}}, \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{G.10}$$

que es precisamente la fórmula (G.9).

Aunque la expresión (G.10) es una función exacta, del número cuántico n y de la potencia m, ésta no describe correctamente las energías cuantizadas. Por ejemplo, para el caso particular $m = 4$, i.e. $V(x) = x^4$, las energías de Bohr-Sommerfeld $E_{BS}(n)$ dadas por (G.10) se pueden comparar con las energías de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger mediante el método de la Malla de Lagrange (véase pie de página 13). Los resultados para las energías obtenidos con la fórmula (G.10) y los resultados numéricos para las energías (exactas en los cuatro dígitos decimales presentados) se muestran en la siguiente tabla para los números cuánticos $n = 0, 10, 50, 100$:

n	E_{exacta}	E_{BS}
0	1.0604	0.8671
10	50.2563	50.2402
50	407.8744	407.8687
100	1020.9900	1020.9864

Debemos enfatizar que, en el límite cuando $n \to \infty$ el comportamiento funcional de las energías de Bohr-Sommerfeld (G.9) coincide con el de la expansión de la energía exacta

$$E \simeq c_M n^{\frac{1}{M}} \left(1 + \frac{a}{n} + \ldots\right),$$

en donde

$$c_M = c_M^{(BS)} = \left(\hbar M B\left(\frac{1}{2}, M\right)\right)^{\frac{1}{M}},$$

$$a^{(BS)} = \frac{m}{m+2}, \quad M = \frac{1}{m} + \frac{1}{2}.$$

Es un conocimiento común que la aproximación semiclásica de la solución a la ecuación de Schrödinger es más precisa para números cuánticos grandes (como hemos visto en este ejemplo).

No obstante, la condición de cuantización se puede corregir para que se reproduzcan con mayor precisión las energías exactas aún para el caso de números cuánticos pequeños. Esto se consigue agregando una corrección a la aproximación WKB a través de un término adicional[15] γ en la condición de cuantización

$$\frac{1}{\hbar}\int_A^B \sqrt{E - V(x)}\, dx = \left(n + \frac{1}{2} + \gamma\right)\pi\,. \tag{G.11}$$

A esta fórmula puede se le puede llamar como regla de cuantización exacta de Bohr-Sommerfeld.

Para los potenciales de potencia $V(x) = |x|^m$ la fórmula de Bohr-Sommerfeld modificada toma la forma

$$E = \left(\hbar M B\left(\frac{1}{2}, M\right)\left(n + \frac{1}{2} + \gamma(m, n; \hbar)\right)\right)^{\frac{1}{M}}, \tag{G.12}$$
$$M = \frac{1}{m} + \frac{1}{2}.$$

En esta formulación, el objetivo es encontrar una función $\gamma(m, n; \hbar)$ que nos permita reproducir las energías obtenidas numéricamente con alta precisión.

[15] Similar a la corrección de Maslov introducida en el caso del potencial de pozo cuadrado infinito (G.4).

En particular, conocemos exactamente los valores de la corrección γ en los casos $m = 2, \infty$, i.e. $\gamma(2, n; \hbar) = 0$ (oscilador armónico) y[16] $\gamma(\infty, n; \hbar) = \frac{1}{2}$. En general, no se conoce una forma analítica para la corrección $\gamma(m, n; \hbar)$ como función de n para una potencia m fija. Un acercamiento para resolver este problema consiste en proponer una fórmula analítica aproximada para $\gamma(m, n; \hbar) \to \gamma_{\text{aproximada}} = P_N(n)/\sqrt{Q_{2N+2}(n)}$ en donde P, Q son polinomios en el número cuántico n, de grados N y $2N + 2$ respectivamente (N se elige de acuerdo a la precisión requerida), cuyos coeficientes se ajustan para describir las energías exactas numéricamente, y los límites mencionados antes ($m = 2, \infty$).

Por ejemplo, para el caso $m = 4$, *i.e.* $V(x) = x^4$, la aproximación más simple $N = 1$ para la corrección γ tiene la forma

$$\gamma^{(x^4)}_{\text{aprox}}(n) \;=\; \frac{0{,}0265\, n \;+\; 0{,}0416}{\sqrt{n^4 \;+\; 5{,}6459\, n^3 \;-\; 6{,}2201 n^2 \;+\; 22{,}0334\, n \;+\; 0{,}2616}}\,, \tag{G.13}$$

($n = 0, 1, 2, \ldots$) que conduce a energías con suficiente alta precisión, aún para el caso de números cuánticos pequeños. Para más detalles el lector debe consultar la referencia: J.C. del Valle and A.V. Turbiner, Int. Jour. Mod. Phys. A 36 (2021).

La fórmula (G.11) puede ser generalizada al caso de potenciales radiales no-singulares en d-dimensiones $V = V(|r|)$,

$$\frac{1}{\hbar}\int_{r_A}^{r_B} \sqrt{E_{BS} - V(r)}\, dr \;=\; \pi\left(n_r \;+\; \frac{d + 2\ell}{4} \;+\; \gamma\right)\,, \tag{G.14}$$

con el propósito de encontrar la corrección de WKB γ para la cual las energías de Bohr-Sommerfeld E_{BS} coincidiran con las energías exactas E_{exacta}. En (G.14) n_r es el número cuántico

[16] En el caso $m \to \infty$ los puntos de retorno son $a = \pm E^{1/m} \to \pm 1$ y el problema se reduce al de un pozo infinito de anchura 2 para el cual $E_{\text{exacta}} = \hbar^2\pi^2(n+1)^2/4$, $n = 0, 1, 2 \ldots$, mientras que la ecuación (G.10) nos da $E_{\text{BS}} = \hbar^2\pi^2(n + 1/2)^2/4$, $n = 0, 1, 2 \ldots$.

radial y ℓ es el momento angular. Para el caso de potenciales radiales de tipo potencia $V = r^m$ la corrección WKB γ sigue siendo una función pequeña adimensional de los números cuánticos n_r, ℓ y de la dimensión d ($d > 1$).

En caso de potenciales radiales con singularidades en r la fórmula (G.14) debe ser modificada. Por ejemplo, en el caso de la presencia de una singularidad radial del tipo $\sim r^m$ con m real,

$$\frac{1}{\hbar}\int_{r_A}^{r_B}\sqrt{E_{BS}-r^m}\,dr \;=\; \pi\,(n_r \;+\; K+\gamma)\;, \quad n_r \;=\; 0,1,2,... \tag{G.15}$$

donde

$$K \equiv \left(\frac{3(d+2\ell)-2}{8}\right) - \mathrm{sign}(m)\left(\frac{d+2\ell-2}{8}\right)\;.$$

La función *signum* $\mathrm{sign}(m)$ es igual a uno para $m > 0$, y menos uno en caso opuesto. Para la singularidad logarítmica $\sim \log r$, la función signum $\mathrm{sign}(m) = 1$. En todos los casos γ es pequeña $|\gamma| \leq 1/2$. Hay dos casos cuando $\gamma = 0$: para el potencial de oscilador armónico radial $\sim r^2$ y para el potencial Coulombiano en dimensión $d > 1$, $\sim -1/r$. En el último caso,

$$E_{BS} \;=\; E_{exacta} \;=\; -\frac{1}{(2n_r+d+2\ell-1)^2}\;,$$

y la igualdad

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^{r_B}\sqrt{E_{exacta}+1/r)}\,dr \;=\; \pi\left(n_r \;+\; \frac{d+2\ell-1}{2}\right)$$

es válida.

APÉNDICE H

Anuncio del Curso

Temas Selectos de Física Matemática y Teórica II: La ecuación de Schroedinger

Dr. Alexander Turbiner y Dr. Juan Carlos Lopez Vieyra

Curso de la carrera de Física de la Facultad de Ciencias de la UNAM

La clase es de un **CURSO AVANZADO**

Basado principalmente en nuestras propias Notas del Curso que hemos elaborado y actualizado a lo largo de más o menos veinte años de impartir dicho curso. No existe un Libro de Texto en el que todos los temas presendados aparecen juntos. Toda la información necesaria sobre Física y Matemáticas se les proporcionara durante el curso. La calificación se otorgará así:

1. Ejercicios de tarea semanales (obligatorios). Si cumplen con el 100 % de las tareas y 100 % de asistencias tienen garantizada una calificación de 8
2. Al final del curso. Hacemos un examen final formal en modalidad oral basado en una Tarea Final que les presentaremos con un mes de anticipación.

Bibliografía (Principal)

[1] E. Schrödinger, *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules*, *Phys. Rev.*, **28**, (1926) 1049–1070
https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.28.1049

[2] P. M. Morse, *Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels*,
Phys. Rev. **34**. (1929) 57–64

[3] W. Wilson, LXXXIII. *The quantum-theory of radiation and line spectra*,
Philosophical Magazine Series 6, 29:174, (1915) 795-802,
DOI: 10.1080/14786440608635362

[4] A. Sommerfeld, *Zur Quantentheorie der Spektrallinien*,
Annalen der Physik **356** (1916)

[5] L. D. Landau, and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory*, pag. 463-470, Butterworth-Heinemann (2003).

[6] L. Infield and T. E. Hull *The Factorization Method*, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 21- 68 (1951)

[7] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers: Asymptotic Methods and Perturbation Theory (v. 1)*, Springer (1999)

[8] A. V. Turbiner,
The Problem of Spectra in Quantum Mechanics and the Non-Linearization Procedure,
Soviet Phys. - Usp. Fiz. Nauk. **144**, 35-78 (1984),
Sov. Phys. - Uspekhi **27**, 668-694 (1984) (English Translation).

[9] H. Bateman (1953),
Higher Transcendental Functions, Volumes I-III, (Bateman Manuscript Project), (Editors); Harry Bateman, Erdelyi, A.; Magnus, W.; Oberhettinger, F.; Tricomi, F.G. McGraw-Hill Book Company, New York

Índice alfabético

Analíticas, Funciones, 77
Anarmónico, Oscilador, 155
    Base del Oscilador Armónico, 155
Asintótico, Análisis, 102
    Problema de dos niveles, 91

Bloch, Ecuación Generalizada, 149, 165
Bohr-Sommerfeld
    Cuantización de, 227
    Regla de Cuantización Exacta, 237

Conclusiones, 181
Cuantización Canónica, 4
Cuantización, Reglas de, 6

Degeneración, 26
Derivada Covariante, 52, 189
Diagonalización del Hamiltoniano, 69
Dos niveles, Problema de, 87

Espacio de Hilbert, 28
Espacio Funcional, 27
Espacio Lineal, 13
Espectro Discreto, 3
Exactamente Solubles
    Ejemplos, 90
Exactamente solubles
    Potencial de Pöschl-Teller, 215

Función δ de Dirac
    Representación de Fourier, 56
Función $\delta(x)$ de Dirac, 55
Función Analítica, 77
    Puntos Rama, 81
    Radio de Convergencia, 78
    Singularidades, 80
Función de Green, 54
    Ecuación de Poisson, 57
    Sturm-Liouville, 59
Función Gamma, 34

Gaussiana, Integral, 34

Gram-Schmidt, 28

Hamiltoniano, 4, 6, 10
Hermiticidad, 23

Interpolación, 106
Inverso, Problema, 121

Lanczos
    Procedimiento, 65

Método de Reducción de Orden, 44
Método de Variación de Constantes, 44
Morse, Oscilador de, 3

Operador
    Adjunto, 23
    Creación-Aniquilación, 193
    Hermitiano, 23
      Valores Propios, 24
    Sturm-Liouville, 39
      Forma de Schrödinger, 49
Oscilador Armónico
    Operadores de Creación-Aniquilación, 193
    Teoría de Perturbaciones, 141
Oscilador armónico,
    Espectro, 3

Pöschl-Teller
    Potencial de, 215
Planck
    Constante de, 6
Polinomios Ortogonales
    Construcción, 31
    Hermite, 35
    Jacobi, 218
    Legendre, 33
    Para $w(x) = e^{-x^4}$, 35
Potencial Séxtico, 124
Potencial,
    Tipo Potencia, 234
Potencial, Asociado, 122
PT, Simetría, 24

QES, Potenciales, 119, 126
    Potencial Séxtico, 125

Representación Matricial, 62
Riccati, Ecuación de, 148
Riccati-Bloch, 147

Schrödinger, Ecuación de, 1
Sistemas Exactamente Solubles, 115
Solubilidad Cuasiexacta, 124
Sturm
    Teorema de Oscilación, 46
Sturm-Liouville
    Forma de Schrödinger, 49
    Función de Green, 59
    Hermiticidad, 41
    Integral de Energía, 41
    Operador, 39
    Representación Matricial, 62

Teoría de Perturbaciones
    Dalgarno-Lewis, 120
    Ecuación cuadrática, 95, 98, 100

Multiplicativa, 133
Oscilador Anarmónico, 155
Rayleigh-Schrödinger, 112
Transformación de Darboux, 52
Transformación de Norma, 50, 51

Unidades Atómicas, 10

Variacional, Método, 173
Vectores y Valores Propios, 21

WKB, 134
Wronskiano, 42